

ANTECKNINGAR TILL RÄKNEÖVNING 1 & 2 - LINJÄR ALGEBRA

För att verkligen kunna förstå och tillämpa kvantmekaniken så måste vi veta något om den matematik som ligger till grund för formuleringen av vågfunktionen. Därför behöver vi känna till de grundläggande begreppen i linjär algebra, såsom vektorer, matriser, baser, vektorrum, egenvektorer, egenvärden etc.

1. VEKTORER OCH VEKTORRUM

En storhet som har både storlek och riktning kallas för en *vektor* och en storhet som inte har någon riktning, dvs ett "vanligt" tal, kallas för en *skalär*. I 3 dimensioner har en vektor 3 komponenter och uttrycks

$$(1) \quad \mathbf{r} = x\hat{e}_x + y\hat{e}_y + z\hat{e}_z$$

där $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z$ är enhetsvektorerna $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ och $(0, 0, 1)$. Vektorer kan även uttryckas på följande form:

$$(2) \quad \mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Självkoll: Ser du att de två uttrycken är ekvivalenta?

Vektorrum? Ett *vektorrum* är en uppsättning av vektorer som är *slutet* under vektoraddition och skalärmultiplikation. Att vektorrummet är slutet under vektoraddition betyder att *summan av två vektorer som finns i vektorrummet är en tredje vektor i vektorrummet*. För skalärmultiplikation gäller att *produkten av en skalär och en vektor i vektorrummet är en annan vektor i vektorrummet*. I kvantmekaniken tänker vi på ett vektorrum där skalärerna och vektorkomponenterna får vara komplexa tal och vi inte begränsar oss till endast 3 dimensioner.

Vi kan alltså addera två vektorer på följande sätt

$$(3) \quad \mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{c}$$

där resultatet $\mathbf{c}$ också är en vektor. Vektoraddition är *kommutativ*, dvs. $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a}$, och *associativ*, dvs. $\mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c}) = (\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c}$.

Det finns också en noll-vektor $\mathbf{0}$ som verkar på alla vektorer på följande sätt

$$(4) \quad \mathbf{a} + \mathbf{0} = \mathbf{a},$$

och en inversvektor $\mathbf{a}^{-1}$ sådan att

$$(5) \quad \mathbf{a} + \mathbf{a}^{-1} = \mathbf{0}.$$

Vi kan multiplicera en vektor med en skalär på följande sätt

$$(6) \quad \alpha \mathbf{a} = \mathbf{b}$$

där resultatet är en vektor. Skalärmultiplikation är *distributiv* med hänsyn till vektoraddition och skaläraddition

$$(7) \quad \begin{aligned} \alpha(\mathbf{a} + \mathbf{b}) &= \alpha \mathbf{a} + \alpha \mathbf{b} \\ (\alpha + \beta)\mathbf{a} &= \alpha \mathbf{a} + \beta \mathbf{a}. \end{aligned}$$

Skaläraddition är associativ med hänsyn till skalärmultiplikation ("vanlig" multiplikation)

$$(8) \quad \alpha(\beta \mathbf{a}) = (\alpha\beta)\mathbf{a}$$

Självkoll: Vad blir resultatet av $0\mathbf{a}$ och $1\mathbf{a}$?

Vi kan bilda en *linjärkombination* av vektorer i rummet på följande sätt

$$(9) \quad \alpha \mathbf{a} + \beta \mathbf{b} + \gamma \mathbf{c} + \dots$$

En vektor $\mathbf{c}$ sägs vara *linjärt beroende* av en uppsättning vektorer om den kan uttryckas som en linjärkombination av dem. Såklart kan man ju alltid bilda en linjärkombination av noll-vektorn, men om den enda möjligheten att bilda noll-vektorn är att sätta alla koefficienter till noll sägs vektorerna vara *linjärt oberoende*, t.ex. $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ och $\mathbf{c}$ är linjärt oberoende om

$$(10) \quad \alpha \mathbf{a} + \beta \mathbf{b} + \gamma \mathbf{c} = \mathbf{0} \quad \text{endast då} \quad \alpha = \beta = \gamma = 0$$

Ytterligare en vektoroperation är *punktprodukten* (även kallad skalärprodukt, dot product eller inre produkt),

$$(11) \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{cases} |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \cos \phi & \text{om } \mathbf{a} \neq \mathbf{0} \text{ och } \mathbf{b} \neq \mathbf{0} \\ 0 & \text{om } \mathbf{a} = \mathbf{0} \text{ och } \mathbf{b} = \mathbf{0}. \end{cases}$$

Här menar vi med $|\mathbf{a}|$ längden av vektorn $\mathbf{a}$ och ϕ är vinkeln mellan vektorerna $\mathbf{a}$ och $\mathbf{b}$. Längden av en vektor och vinkeln mellan två vektorer ges av

$$(12) \quad \begin{aligned} |\mathbf{a}| &= \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}} \\ \cos \phi &= \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{|\mathbf{a}||\mathbf{b}|} \end{aligned}$$

Självkoll: Hänger du med på uttrycken för längden och vinkeln? Vad blir punktprodukten för *ortogonala* (vinkelräta) vektorer?

Att *normera* en vektor $\mathbf{a}$ betyder att man formulerar en enhetsvektor $\mathbf{u}$ som har samma riktning och är parallell med $\mathbf{a}$, dvs. $\mathbf{u} = \lambda \mathbf{a}$ där $\lambda > 0$. Vi kan bestämma normeringsfaktorn λ och den normerade vektorn $\mathbf{u}$:

$$(13) \quad 1 = |\mathbf{u}| = |\lambda \mathbf{a}| = \lambda |\mathbf{a}| \Rightarrow \lambda = \frac{1}{|\mathbf{a}|} \Rightarrow \mathbf{u} = \frac{1}{|\mathbf{a}|} \mathbf{a}.$$

2. BASER

Ett uppsättning av n linjärt oberoende vektorer som spänner upp¹ ett n dimensionellt rum kallas en *bas* (n finit). För basen

$$(14) \quad \mathbb{B} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$$

kan vi uttrycka en godtycklig vektor som en summa över basen på följande sätt

$$(15) \quad \mathbf{a} = \sum_n a_n \mathbf{e}_n = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + \dots + a_n \mathbf{e}_n.$$

Varje sådan vektor är unikt beskriven av sina vektorkomponenter

$$(16) \quad \mathbf{a} \leftrightarrow (a_1, a_2, \dots, a_n).$$

När vi utför operationer på vektorer är det oftast komponenterna vi arbetar med

$$(17) \quad \begin{aligned} \mathbf{a} + \mathbf{b} &\leftrightarrow (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \dots, a_n + b_n) \\ \alpha \mathbf{a} &\leftrightarrow (\alpha a_1, \alpha a_2, \dots, \alpha a_n) \\ \mathbf{0} &\leftrightarrow (0, 0, \dots, 0) \end{aligned}$$

Självkoll: Hur ser vektorkomponenterna för inversvektorn ut?

Nackdelen med att arbeta med komponenterna är att man måste bestämma sig för en bas och hålla sig till den.

Ortonormal (ON) bas? I kvantmekaniken är det nästan alltid önskvärt att arbeta med vektorer som är uttryckta i en *ortonormal* bas. Att basen är ortonormal betyder att basvektorerna är ortogonala (vinkelräta sinsemellan) och normerade till längden 1. För två basvektorer i en ON bas, $\mathbf{e}_i$ och $\mathbf{e}_j$, får vi följande uttryck för punktprodukten

$$(18) \quad \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{om } i = j \\ 0 & \text{om } i \neq j \end{cases}$$

Självkoll: Hänger du med på varför det blir så?

Det som är så bra med ON-basen är att uttrycket för punktprodukten förenklas avsevärt. Om vi låter $\mathbb{B} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ vara en 3 dimensionell ON-bas i rummet och

¹Tänk dig hur ett vanligt 3 dimensionellt rum spänns upp av 3 vektorer

att de godtyckliga vektorerna $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ och $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ finns i basen, då

$$\begin{aligned}
 \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} &= (a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + a_3 \mathbf{e}_3) \cdot (b_1 \mathbf{e}_1 + b_2 \mathbf{e}_2 + b_3 \mathbf{e}_3) \\
 &= a_1 b_1 \mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{e}_1 + a_2 b_2 \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{e}_2 + a_3 b_3 \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{e}_3 \\
 (19) \quad &= a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \\
 |\mathbf{a}| &= \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}.
 \end{aligned}$$

Självkoll: Hur ser uttrycket för punktprodukten ut för n dimensioner? Hur ser normeringsfaktorn λ ut för en godtycklig vektor $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ uttryckt i en ON-bas? Hint: Titta på Eq. (13).

För en ON-bas $\mathbb{B} = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ i rummet, kan dessutom vektorkomponenterna för en vektor i rummet, $\mathbf{a}$, bestämmas på följande enkla sätt

$$(20) \quad \mathbf{a} = (\mathbf{e}_1 \cdot \mathbf{a})\mathbf{e}_1 + (\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{a})\mathbf{e}_2 + (\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{a})\mathbf{e}_3.$$

3. MATRISER

Vi har ett 3 dimensionellt vektorrum, vi multiplicerar vektorerna i rummet med en och samma skalär, eller roterar dem med samma vinkel runt x -axeln. Det vi precis har gjort kallas en *linjär transformation*, $\hat{T}$. Det en linjär transformation gör är att den tar varje vektor i vektorrummet och transformerar den till en ny vektor ($\mathbf{a} \rightarrow \mathbf{a}' = \hat{T}\mathbf{a}$). Som namet antyder krävs det att transformationen är linjär för godtyckliga vektorer och skalärer, dvs.

$$(21) \quad \hat{T}(\alpha\mathbf{a} + \beta\mathbf{b}) = \alpha(\hat{T}\mathbf{a}) + \beta(\hat{T}\mathbf{b}).$$

En linjär transformation kan representeras av en matris. I en ON-bas är en sådan matris kvadratisk och kan för n dimensioner ställas upp på följande vis:

$$(22) \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \dots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \dots & T_{nn} \end{pmatrix}$$

där T_{ij} är *matriselementet* som finns på rad i och kolumn j . I kvantmekaniken finns det något som kallas för *kvantoperatorer*, de är faktiskt också exempel på *linjära transformationer*. Nu när vi arbetar med matriser måste vi också ta hänsyn till *matrisoperationer*. De flesta matrisoperationer fungerar på liknande sätt som sina vektormotsvarigheter (vad är en vektor annat än en $1 \times n$ eller $m \times 1$ matris). En skillnad är dock att man behöver ta hänsyn till matrisens typ (dvs. dess dimensioner). Om $\mathbf{S}$ och $\mathbf{T}$ är matriser av samma typ kan man addera dem och bilda en ny matris $\mathbf{U}$ av samma typ

$$(23) \quad \mathbf{S} + \mathbf{T} = \mathbf{U} \leftrightarrow S_{ij} + T_{ij} = U_{ij}.$$

I sådana fall gäller även att matrisaddition är kommutativ och associativ, och det finns en *nollmatrix* sådan att $\mathbf{T} + \mathbf{0} = \mathbf{T}$.

En matris $\mathbf{T}$ kan multipliceras med en skalär

$$(24) \quad \begin{aligned} \alpha(\mathbf{A} + \mathbf{B}) &= \alpha\mathbf{A} + \alpha\mathbf{B} \\ (\alpha + \beta)\mathbf{A} &= \alpha\mathbf{A} + \beta\mathbf{A} \\ (\alpha\beta)\mathbf{A} &= \alpha(\beta\mathbf{A}). \end{aligned}$$

Multiplikation av en matris med en annan är lite mer invecklad än multiplikation av en skalär och en matris. Det första man måste ta hänsyn till är att matriserna är av sådana typer att de faktiskt går att multiplicera med varandra. För att matrisen $\mathbf{S}$ ska kunna multipliceras med matrisen $\mathbf{T}$ gäller det att antalet element i en kolumn i $\mathbf{S}$ är lika många som antalet element i en rad i $\mathbf{T}$.

$$(25) \quad \begin{aligned} \mathbf{S}(m \times n) \cdot \mathbf{T}(n \times p) &= \mathbf{D}(m \times p) \quad \text{ok!} \\ \mathbf{S}(n \times m) \cdot \mathbf{T}(p \times s) &\quad \text{inte ok!} \\ \text{där } n &\neq m \neq p \neq s \end{aligned}$$

Självkontroll: Är matrismultiplikation kommutativ?

Om typerna stämmer så gäller att

$$(26) \quad \mathbf{U} = \mathbf{ST} \leftrightarrow U_{ij} = \sum_{k=1}^n S_{ik}T_{kj}$$

där U_{ij} motsvarar elementet på den i :e raden och den j :e kolumnen i matrisen $\mathbf{U}$. Om matrisen $\mathbf{S}$ har m rader och matrisen $\mathbf{T}$ har p kolumner så kommer matrisen $\mathbf{U}$ vara $m \times p$ och antalet matriselement U_{ij} vara $m \cdot p$.

Varje matris (och vektor) kan transponeras. Vid transponering av matrisen $\mathbf{T}$ byter raderna och kolumnerna i matrisen plats med varandra, den resulterande matrisen kallas för matrisens transponat $\tilde{\mathbf{T}}$.

$$(27) \quad \tilde{\mathbf{T}} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{21} & \dots & T_{n1} \\ T_{12} & T_{22} & \dots & T_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1n} & T_{2n} & \dots & T_{nn} \end{pmatrix}$$

En $n \times n$ matris kallas *symmetrisk* om $\tilde{\mathbf{T}} = \mathbf{T}$ och *antisymmetrisk* om $\tilde{\mathbf{T}} = -\mathbf{T}$.

I kvantmekaniken är matriselementen komplexa tal. Man kan därför definiera ytterligare en matrisoperation, *komplexkonjugatet* av en matris, $\mathbf{T}^*$, där varje matriselement komplexkonjugeras.

$$(28) \quad \mathbf{T}^* = \begin{pmatrix} T_{11}^* & T_{12}^* & \cdots & T_{1n}^* \\ T_{21}^* & T_{22}^* & \cdots & T_{2n}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1}^* & T_{n2}^* & \cdots & T_{nn}^* \end{pmatrix}$$

Självkoll: Vad blir transponatet och komplexkonjugatet av kolumnvektorn

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}, \quad (a_n \text{ komplexa}) ?$$

Matrismultiplikation är generellt inte kommutativ, men för kvadratiske matriser kan vi definiera *kommutatorn*:

$$(29) \quad [\mathbf{S}, \mathbf{T}] \equiv \mathbf{ST} - \mathbf{TS}$$

Transponatet av en matrismultiplikation blir produkten av transponatet av de individuella matriserna i omvänd ordning

$$(30) \quad (\mathbf{ST})^T = \mathbf{T}^T \mathbf{S}^T.$$

Självkoll: Ser du hur detta stämmer?

En enhetsmatris, $\mathbf{I}$, är en kvadratisk matris där matriselementen är 1 på huvuddiagonalen och 0 annars, dvs $I_{ij} = \delta_{ij}$.

$$(31) \quad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

Självkoll: Stämmer följande likhet : $\mathbf{T} \cdot \mathbf{I} = \mathbf{I} \cdot \mathbf{T}$? Bevisa ditt svar.

En kvadratisk matris har även en *invers* $\mathbf{T}^{-1}$ sådan att

$$(32) \quad \mathbf{T}^{-1} \mathbf{T} = \mathbf{T} \mathbf{T}^{-1} = \mathbf{I}.$$

Det finns dock ett krav för att inversmatrisen ska existera: matrisens *determinant* måste vara skild från noll!

En determinant är ett **tal** som associeras med varje kvadratisk matris och brukar betecknas $\det(\mathbf{T})$ eller

$$(33) \quad \begin{vmatrix} T_{11} & T_{21} & \dots & T_{n1} \\ T_{12} & T_{22} & \dots & T_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1n} & T_{2n} & \dots & T_{nn} \end{vmatrix}$$

Man kan säga att determinanten är en funktion från mängden kvadratiska matriser till mängden tal. För en 1×1 matris, $\mathbf{T} = (T)$ blir $\det(\mathbf{T}) = T$. För 2×2 matrisen $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix}$ blir $\det(\mathbf{S}) = S_{11}S_{22} - S_{21}S_{12}$. För 3×3 matrisen blir det lite mer komplicerat,

$$(34) \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} \end{pmatrix}$$

ger $\det(\mathbf{U}) = U_{11}U_{22}U_{33} + U_{12}U_{23}U_{31} + U_{13}U_{21}U_{32} - U_{31}U_{22}U_{13} - U_{32}U_{23}U_{11} - U_{33}U_{21}U_{12}$. En bra minnesregel för uträkning av stora determinanter är *Sarrus regel*:

$$\begin{array}{ccccc} & + & & + & & + \\ & U_{11} & & U_{12} & & U_{13} \\ & \swarrow & & \nearrow & & \swarrow \nearrow \\ U_{21} & & U_{22} & & U_{23} & \\ \nearrow & & \swarrow & & \swarrow & \\ U_{31} & & U_{32} & & U_{33} & \\ & - & & - & & - \end{array}$$

Inversen av en matrismultiplikation är produkten av inverserna för de individuella matriserna i omvänd ordning

$$(35) \quad (\mathbf{ST})^{-1} = \mathbf{T}^{-1}\mathbf{S}^{-1}.$$

4. BASBYTE

Ett basbyte är egentligen ett byte av perspektiv. Tänk dig en planetmodell i ett klassrum, ett lämpligt koordinatsystem för att beskriva det lilla modell-jordklotets rörelse kring modell-solen skulle kunna vara centrerat på en punkt i rummet eller centrerat på modell-solen. Om vi istället ändrar oss och nu vill studera det riktiga jordklotets rotation kring den riktiga solen, skulle det nuvarande koordinatsystemet vara högst olämpligt. Ett bättre val skulle, inte så förvånande, t.ex. vara ett koordinatsystem centrerat på den riktiga solen. Vi måste därför byta bas.

Antag att vi har en bas $\mathbb{B}_e = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2)$ i ett plan. I den basen har vektorn $\mathbf{a}$ komponenterna $\mathbf{a}_e = (a_1, a_2)$. Vi har två linjärt oberoende vektorer $\mathbf{f}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$ och $\mathbf{f}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2)$, dessa två vektorer kan bilda en ny bas i planet, $\mathbb{B}_f$. Vi kan uttrycka $\mathbf{a}$ i den nya basen på följande sätt:

Steg 1: Uttryck den gamla basens vektorer som en linjärkombination av den nya basens vektorer

$$(36) \quad \begin{cases} \mathbf{e}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_2 \\ \mathbf{e}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_2 \end{cases}$$

Steg 2: Sätt in detta i $\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2$

$$\mathbf{a} = a_1\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_1 + \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_2\right) + a_2\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_1 - \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_2\right) = \frac{a_1 + a_2}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_1 + \frac{a_1 - a_2}{\sqrt{2}}\mathbf{f}_2$$

Vi kan uttrycka komponenterna för den gamla basen i den nya basen på matrisform

$$(37) \quad \begin{pmatrix} \frac{a_1 + a_2}{\sqrt{2}} \\ \frac{a_1 - a_2}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

där $\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$ kallas basbytesmatrisen från $\mathbb{B}_e$ till $\mathbb{B}_f$. I n dimensioner så skrivs den gamla basens vektorer som linjärkombinationen av de nya på följande sätt:

$$(38) \quad \mathbf{e}_n = \sum_{i=1}^n S_{ij}\mathbf{f}_i \quad (j = 1, 2, \dots, n),$$

där S_{ij} är elementen i basbytesmatrisen (dvs. koefficienterna för linjärkombinationerna). Komponenterna för en vektor $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ i den nya basen blir nu

$$(39) \quad a_i^{\mathbb{B}_f} = \sum_{j=1}^n S_{ij}a_j^{\mathbb{B}_e}$$

Vi kan uttrycka sambandet mellan baserna $\mathbb{B}_e$ och $\mathbb{B}_f$ och basbytesmatrisen, $\mathbf{S}$, på följande sätt:

$$(40) \quad \mathbf{a}^{\mathbb{B}_f} = \mathbf{S}\mathbf{a}^{\mathbb{B}_e}.$$

Basbytesmatrisen $\mathbf{S}$ är inverterbar, det betyder att det finns en annan basbytesmatris $\mathbf{S}^{-1}$ som tar en vektor från $\mathbb{B}_f$ tillbaka till $\mathbb{B}_e$.

Om vi introducerar ytterligare en bas $\mathbb{B}_g$ och $\mathbf{U}$ är basbytesmatrisen från $\mathbb{B}_f$ till $\mathbb{B}_g$, så är $\mathbf{US}$ basbytesmatris från $\mathbb{B}_e$ till $\mathbb{B}_g$.

5. EGENVEKTORER OCH EGENVÄRDEN

Vi återvänder nu till konceptet av linjära transformationer och noterar att vissa vektorer inte ändras med mer än en multiplikation med en skalär under transformationen. Sådana vektorer kallas transformationens *egenvektorer* och skalären som egenvektorn multipliceras med kallas *egenvärdet*. Vi kan uttrycka detta som en egenvärdesekvation på matrisform (observera att vi har då valt en bas)

$$(41) \quad \mathbf{T}\mathbf{a} = \lambda\mathbf{a}, \quad \mathbf{a} \neq \mathbf{0}.$$

där $\mathbf{a}$ är egenvektorn och λ egenvärdet. En alternativ formulering av ekvationen ges enligt

$$(42) \quad (\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{a} = \mathbf{0}.$$

För att bestämma $\mathbf{a}$ och λ måste vi lösa egenvärdesekvationen. Den enda icke-triviala lösningen (dvs. lösningen $\mathbf{a} = \mathbf{0}$ är inte så givande här) fås när determinanten av $(\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I})$ är lika med noll,

$$(43) \quad \det(\mathbf{T} - \lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} (T_{11} - \lambda) & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & (T_{22} - \lambda) & \dots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \dots & (T_{nn} - \lambda) \end{vmatrix} = 0.$$

Lösningen till ekvationen blir ett algebraiskt uttryck som kallas den *karakteristiska ekvationen*:

$$(44) \quad c_n\lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + c_1\lambda + c_0 = 0$$

Rötterna till den karakteristiska ekvationen är egenvärdena. Insättning av egenvärdena i egenvärdesekvationen ger oss egenvektorerna.

Om vi kan finna n distinkta egenvärden till en $n \times n$ matris, kallas matrisen *diagonaliserbar*, dvs. den kan uttryckas på följande form:

$$(45) \quad \mathbf{T} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

med de normerade egenvektorerna givna enligt

$$(46) \quad \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}.$$

I kvantmekaniken så är vågfunktionen ψ_E egenvektor till *Hamiltonianen*, $\mathbf{H}$, och dess egenvärde är vågfunktionens energi, E , dvs

$$(47) \quad \mathbf{H}\psi_E = E\psi_E.$$

6. RELATERADE PROBLEM

Uppgift 1: 1-P7. Låt $\mathbf{A} = \mathbf{x} + 2\mathbf{y} + 3\mathbf{z}$ och $\mathbf{B} = \mathbf{y} - \frac{1}{2}\mathbf{z}$ vara två vektorer

a) Beräkna vektorerna $\mathbf{A} + \mathbf{B}$ och $\mathbf{A} - 3\mathbf{B}$

Lösningsförslag.

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \mathbf{x} + (2+1)\mathbf{y} + (3 - \frac{1}{2})\mathbf{z} = \mathbf{x} + 3\mathbf{y} + \frac{5}{2}\mathbf{z}$$

$$\mathbf{A} - 3\mathbf{B} = \mathbf{x} + (2-3)\mathbf{y} + (3 + \frac{3}{2})\mathbf{z} = \mathbf{x} - \mathbf{y} + \frac{9}{2}\mathbf{z}$$

e) Beräkna skalärprodukterna $\mathbf{x} \cdot \mathbf{A}$, $\mathbf{y} \cdot \mathbf{A}$, $\mathbf{z} \cdot \mathbf{B}$

Lösningsförslag. $\mathbf{A}$ och $\mathbf{B}$ är båda uttryckta i basen $\mathbb{B} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})$. Vi tar basvektorerna som ortogonala och normaliserade $\mathbf{x} = (1, 0, 0)$, $\mathbf{y} = (0, 1, 0)$, $\mathbf{z} = (0, 0, 1)$, dvs de bildar en ON-bas. Vi kan då räkna ut skalärprodukten mellan två vektorer enligt $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3$. I detta fall får vi:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{A} = 1 \times 1 + 0 \times 2 + 0 \times 3 = 1$$

$$\mathbf{y} \cdot \mathbf{A} = 0 \times 1 + 1 \times 2 + 0 \times 3 = 2$$

$$\mathbf{z} \cdot \mathbf{B} = 0 \times 1 + 1 \times \left(-\frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2}$$

Uppgift 2: Matrisräkning (Problem A.8 (Giffiths)). Givet de två matriserna:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & i \\ 2 & 0 & 3 \\ 2i & -2i & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{pmatrix}$$

räkna ut:

a) $\mathbf{A} + \mathbf{B}$

Lösningsförslag.

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{pmatrix} -1+2 & 1+0 & i+(-i) \\ 2+0 & 0+1 & 3+0 \\ 2i+i & -2i+3 & 2+2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3i & 3-2i & 4 \end{pmatrix}$$

b) $\mathbf{AB}$

Lösningssförslag.

$$\begin{aligned} \mathbf{AB} &= \begin{pmatrix} -1 \times 2 + 1 \times 0 + i \times i & -1 \times 0 + 1 \times 1 + i \times 3 & -1 \times (-i) + 1 \times 0 + i \times 2 \\ 2 \times 2 + 0 \times 0 + 3 \times i & 2 \times 0 + 0 \times 1 + 3 \times 3 & 2 \times (-i) + 0 \times 0 + 3 \times 2 \\ 2i \times 2 + (-2i) \times 0 + 2 \times i & 2i \times 0 + (-2i) \times 1 + 2 \times 3 & 2i \times (-i) + (-2i) \times 0 + 2 \times 2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -3 & 1+3i & 3i \\ 4+3i & 9 & 6-2i \\ 6i & 6-2i & 6 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

e) $\mathbf{A}^*$

Lösningssförslag. Bara den komplexa delen byter tecken $z^* = a - bi$ om $z = a + bi$.

$$\mathbf{A}^* = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -i \\ 2 & 0 & 3 \\ -2i & 2i & 2 \end{pmatrix}$$

h) $\det(\mathbf{B})$

Lösningssförslag. Kom ihåg Sarrus' regel

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} 2 & 0 & -i \\ 0 & 1 & 0 \\ i & 3 & 2 \end{vmatrix} &= (2 \times 1 \times 2 + 0 \times 0 \times i + (-i) \times 0 \times 3) - (i \times 1 \times (-i) + 3 \times 0 \times 2 + 2 \times 0 \times 2) \\ &= 4 - 1 \\ &= 3 \end{aligned}$$

Uppgift 3: Ett egenvärdesproblem. Finn egenvärdena och egenvektorerna till följande matris:

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$$

Lösningssförslag. Formeln för egenvärdesekvationen är $(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{a} = \mathbf{0}$. Den karakteristiska ekvationen är:

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 4-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)(4-\lambda) - 4 = \lambda^2 - 5\lambda = 0$$

Vi får rötterna till den karakteristiska ekvationen genom att lösa pq-ekvationen:

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{5}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{5}{2}\right)^2} = \frac{5}{2} \pm \frac{5}{2} \\ \Rightarrow \lambda_1 &= \frac{5}{2} + \frac{5}{2} = 5 \\ \Rightarrow \lambda_2 &= \frac{5}{2} - \frac{5}{2} = 0 \end{aligned}$$

Vi har alltså två egenvärden, $\lambda = 5$ och $\lambda = 0$. Nu ska vi bara bestämma de egenvektorer $\mathbf{a} = (a_1, a_2)$, som hör till de båda egenvärdena. Vi kommer ihåg formeln för egenvärdesekvationen $(\mathbf{M} - \lambda \mathbf{I})\mathbf{a} = \mathbf{0}$, insättning av $\lambda = 5$ ger:

$$\begin{pmatrix} -4 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Vi kan skriva detta på linjär form genom att multiplicera matrisen med egenvektorn vilket ger:

$$\begin{cases} -4a_1 + 2a_2 = 0 \\ 2a_1 - a_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow 2a_1 = a_2 \Rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Så för egenvärdet $\lambda = 5$ får vi egenvektorn $\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$. För egenvärdet $\lambda = 0$ kan vi på samma sätt räkna ut egenvektorn:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Linjär form ger:

$$\begin{cases} a_1 + 2a_2 = 0 \\ 2a_1 + 4a_2 = 0 \end{cases} \Rightarrow a_1 = -2a_2 \Rightarrow \mathbf{a} = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Till slut har vi även bestämt egenvektorn $\mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}$ för egenvärdet $\lambda = 0$.