34: Apêndice Matemático 1

- Operadores e suas representações matriciais
  - Transformações entre bases
  - Matrizes equivalentes
  - Autovalores de uma matriz
- Diagonalização de uma matriz
  - Exemplo
  - Exercícios

Operadores e suas representações matriciais

Seja $\hat{O}$ um operador linear num espaço vetorial E sobre os números complexos. Seja $\{\vec{e}_i\}$, com $i = 1, \ldots, n$, uma base desse espaço, que, portanto, tem dimensão n. Aplicando-se $\hat{O}$ a um elemento da base, por exemplo, $\vec{e}_i$, tem-se um novo vetor do espaço, que pode ser expandido na base dada. Esta expansão é escrita

$$\hat{O}\vec{e}_i = \sum_{j=1}^{n} O_{ji}\vec{e}_j \tag{868}$$

onde os O_{ji} são números complexos, denominados *elementos de matriz*de $\hat{O}$ na base $\{\vec{e}_i\}$.

Seja $\vec{v}$ um vetor qualquer de E, tal que

$$\vec{v} = \sum_{i=1}^{n} v_i \vec{e}_i \ . \tag{869}$$

Temos

$$\hat{O}\vec{v} = \hat{O}\sum_{i=1}^{n} v_i \vec{e}_i = \sum_{i=1}^{n} v_i \hat{O}\vec{e}_i \tag{870}$$

e, usando (869),

$$\hat{O}\vec{v} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} v_i O_{ji} \vec{e}_j \tag{871}$$

A equação (872) mostra que, de posse dos elementos de matriz de $\hat{O}$, é possível determinar a ação deste operador sobre qualquer vetor. Ou seja, escolhida uma base, o operador pode ser substituído pelo conjunto de seus elementos de matriz. Convenciona-se escrever o conjunto desses elementos de matriz da seguinte forma:

$$O = \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \dots & O_{1n} \\ O_{21} & O_{22} & \dots & O_{2n} \\ \dots. & \dots. & \dots & \dots. \\ O_{n1} & O_{n2} & \dots & O_{nn} \end{pmatrix} \tag{872}$$

Uma segunda maneira de ler a eq.(872) é : as componentes do vetor $\hat{O}\vec{v}$ em relação à base dada são os números complexos

$$\left(\hat{O}\vec{v}\right)_j = \sum_{i=1}^{n} O_{ji} v_i \tag{873}$$

Se representarmos os vetores por matrizes coluna cujos elementos são as suas componentes,

$$\vec{v} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{pmatrix} \tag{874}$$

podemos representar a ação de um operador sobre um vetor assim:

$$\hat{O}\vec{v} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} O_{11} & O_{12} & \dots & O_{1n} \\ O_{21} & O_{22} & \dots & O_{2n} \\ \dots. & \dots. & \dots & \dots. \\ O_{n1} & O_{n2} & \dots & O_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \dots \\ v_n \end{pmatrix} \tag{875}$$

onde, para calcular o segundo membro, usam-se as regras de produtos de matrizes usuais.

O leitor, como exercício, poderá mostrar que a representação matricial do operador $\hat{O}_1\hat{O}_2$, produto dos operadores $\hat{O}_1$ e $\hat{O}_2$, é dada pelo produto, no sentido de matrizes, das matrizes que representam $\hat{O}_1$ e $\hat{O}_2$, nesta ordem. Recordemos que o produto das matrizes A, de elementos A_{ij} e B, de elementos B_{ij}, é a matriz de elementos

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} A_{ik}B_{kj} \tag{876}$$

regra que pode ser obtida facilmente da equação (869).

Seja $\{\vec{f}_i\}$ uma segunda base. Podemos escrever

$$\hat{O}\vec{f}_i = \sum_{j=1}^{n} (O_f)_{ji}\,\vec{f}_j \tag{877}$$

enquanto que, em relação à primeira (para o **mesmo** $\hat{O}$)

$$\hat{O}\vec{e}_i = \sum_{j=1}^{n} (O_e)_{ji}\,\vec{e}_j \tag{878}$$

onde indicamos com O_f e O_e as matrizes que representam $\hat{O}$ nas bases $\{\vec{f}_i\}$ e $\{\vec{e}_i\}$ respectivamente. As matrizes O_f e O_e representam o mesmo operador em bases distintas. Matrizes com esta propriedades são ditas *equivalentes*. O que caracteriza matrizes equivalentes?

Transformações entre bases

Um elemento qualquer da base (f) pode ser expandido na base (e):

$$\vec{f_i} = \sum_m f_{mi}\vec{e}_m \tag{879}$$

e analogamente,

$$\vec{e}_s = \sum_r g_{rs}\vec{f_r} \tag{880}$$

Logo, segue que

$$\vec{e}_s = \sum_r g_{rs}\vec{f_r} = \sum_r g_{rs}\sum_m f_{mr}\vec{e}_m \tag{881}$$

ou

$$\vec{e}_s = \sum_m \left(\sum_r f_{mr}g_{rs}\right)\vec{e}_m \tag{882}$$

de onde segue, imediatamente, que

$$\sum\nolimits_r f_{mr}g_{rs} = \delta_{ms} \tag{883}$$

Invertendo os papeis das bases (e) e (f), obtém-se, da mesma maneira,

$$\sum\nolimits_m g_{rm}f_{mi} = \delta_{ri} \tag{884}$$

Seja F a matriz cujos elementos são f_{mi}, e G aquela cujos elementos são g_{rm}. Então as equações (884) e (885) são escritas, respectivamente,

$$FG = 1 \tag{885}$$

e

$$GF = 1 \tag{886}$$

Quando, entre duas matrizes, existe este par de relações, uma é o inverso da outra. Ou seja,

$$G = F^{-1} \tag{887}$$

ou, equivalentemente,

$$F = G^{-1} \tag{888}$$

A condição necessária e suficiente para que uma matriz tenha inverso é que seu determinante seja diferente de zero.

Matrizes equivalentes

Sejam O_f e O_e duas representações matriciais do operador $\hat{O}$, ou seja, duas matrizes equivalentes. Temos

$$\hat{O}\vec{f_i} = \sum_j (O_f)_{ji} \vec{f_j} = \sum_j (O_f)_{ji} \sum_{rl} f_{lj}\vec{e_l} \tag{889}$$

Por outro lado,

$$\hat{O}\vec{f_i} = \hat{O}\sum_m f_{mi}\vec{e}_m = \sum_m f_{mi}\hat{O}\vec{e}_m = \sum_m f_{mi} \sum_l (O_e)_{lm} \vec{e_l} \tag{890}$$

Igualando (890) e (891), temos

$$\sum_j f_{lj} (O_f)_{ji} = \sum_m (O_e)_{lm} f_{mi} \tag{891}$$

ou, na linguagem das matrizes,

$$FO_f = O_e F \tag{892}$$

ou, na forma mais comum,

$$O_e = FO_f F^{-1} \tag{893}$$

Em palavras, duas matrizes A e B são equivalentes se existir uma matriz não-singular (isto é, que tem inversa) F tal que

$$A = FBF^{-1} \tag{894}$$

Uma relação desse tipo entre matrizes A e B é dita também uma transformação de equivalência, ou de semelhança. A riqueza de sinônimos revela a idade do problema!

Exercícios:

1. Mostre que, se o operador $\hat{O}$ possui inverso e se a representação matricial dele em uma determinada base é a matriz A, então a representação matricial de $\hat{O}^{-1}$ nesta mesma base é a matriz A^{-1}.
2. Mostre que duas matrizes equivalentes têm o mesmo traço e o mesmo determinante. Por isso essas duas quantidades são ditas *invariantes* de uma matriz.

Autovalores de uma matriz

Sejam $\hat{O}$ um operador linear e $\vec{v} \neq 0$ um vetor tais que

$$\hat{O}\vec{v} = \lambda\vec{v} \tag{895}$$

onde λ é um número complexo. Diz-se que $\vec{v}$ é um autovetor de $\hat{O}$, e que λ é um *autovalor* de $\hat{O}$. A equação acima pode ser escrita assim:

$$\left(\hat{O} - \lambda\hat{1}\right)\vec{v} = 0 \tag{896}$$

Suponhamos que o operador $\hat{O} - \lambda\hat{1}$ tenha inverso, denotado por $\hat{U} = \left(\hat{O} - \lambda\hat{1}\right)^{-1}$. Então, aplicando-se $\hat{U}$ à esquerda de (897), temos

$$\hat{U}\left(\hat{O} - \lambda\hat{1}\right)\vec{v} = \vec{v} = 0 \tag{897}$$

o que é absurdo, pois $\vec{v}$, como autovetor, deve ser não-nulo. Conclui-se que o operador $\left(\hat{O} - \lambda\hat{1}\right)$ é singular, ou seja, não tem inverso. Em consequência, suas representações matriciais também não terão inverso.

A versão matricial da eq.(897) é

$$\sum_j \left(O_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right) v_j = 0 \tag{898}$$

onde O_{ij} é o elemento ij da matriz O, que representa o operador $\hat{O}$em alguma base, e δ_{ij} é o elemento ij da matriz que representa o operador $\hat{1}$. Em consequência da conclusão acima, o primeiro membro da eq.(899) deve ser uma matriz singular (sem inverso). Logo, devemos ter

$$\det\left(O_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right) = 0 \tag{899}$$

que é uma maneira simplificada de dizer que o determinante da matriz cujo elemento genérico é $O_{ij} - \lambda\delta_{ij}$ é zero.

Esta equação, λ sendo a incógnita, é uma equação algébrica de ordem igual à dimensão n do espaço, ou, o que é o mesmo, igual à ordem da matriz. Em princípio tem n soluções, mas não necessariamente distintas. Estas soluções são os autovalores do operador, e são também chamadas de autovalores da matriz que representa o operador. A equação (900) é conhecida como *equação secular*.

Diagonalização de uma matriz

Neste capítulo, diferentemente do que ocorreu nos anteriores, omitiremos os sinais de somatória, usando a convenção de que índices repetidos indicam a soma *sobre todos os valores desses índices.*

Seja A uma matriz, de elementos A_{ij}, que são números complexos. Seja λ_1 um autovalor da matriz A. Isto quer dizer que existe $\vec{v}$ tal que[36]

$$A\vec{v} = \lambda_1 \vec{v} \tag{900}$$

ou

$$\begin{aligned} A_{11}v_1 + A_{12}v_2 + \ldots + A_{1n}v_n &= \lambda_1 v_1 \\ A_{12}v_1 + A_{22}v_2 + \ldots + A_{2n}v_n &= \lambda_1 v_2 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots &= \ldots\ldots\ldots \\ A_{1n}v_1 + A_{2n}v_2 + \ldots + A_{nn}v_n &= \lambda_1 v_n \end{aligned} \tag{901}$$

Mais geralmente, seja $\vec{v}_k$ o autovetor correspondente ao autovalor λ_k,

$$A\vec{v}_k = \lambda_k \vec{v}_k \tag{902}$$

Escrevendo a relação acima em componentes, temos

$$\left(A\vec{v}_k\right)_i = \lambda_k \left(\vec{v}\right)_i \tag{903}$$

ou

$$A_{ij}\left(\vec{v}_k\right)_j = \lambda_k \left(\vec{v}_k\right)_i \tag{904}$$

Considere a matriz cujos elementos são

$$\rho_{ik} = \left(\vec{v}_k\right)_i \tag{905}$$

então

$$A_{ij}\left(\vec{v}_k\right)_j = A_{ij}\rho_{jk} = \lambda_k \rho_{ik} \tag{906}$$

ou, definindo a matriz diagonal Λ, de elementos

$$\Lambda_{ij} = \lambda_j \delta_{ij} \quad (907)$$

$$(A\rho)_{ik} = (\rho\Lambda)_{ik} \quad (908)$$

ou, como uma equação matricial,

$$A\rho = \rho\Lambda \quad (909)$$

Se a matriz ρ for inversível, isto é, se existir ρ^{-1}, obtemos, aplicando ρ^{-1} à esquerda,

$$\rho^{-1}A\rho = \Lambda \quad (910)$$

A matriz A foi transformada, por uma "transformação de semelhança", numa matriz diagonal. Seja $\hat{A}$ o operador linear que, em relação a uma determinada base, possui a representação matricial A. A equação (911) mostra que, no caso de ρ possuir inversa, existe uma outra base na qual $\hat{A}$ é representado pela matriz diagonal Λ.

Que matriz é ρ? Sejam

$$\vec{v}_k = \begin{pmatrix} v_{k1} \\ v_{k2} \\ \dots \\ v_{kn} \end{pmatrix}$$

os autovetores de A, para $k = 1 \dots n$. Seja a matriz construída justapondo-se essas matrizes colunas designada por v. Então

$$v = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{21} & \dots & v_{n1} \\ v_{12} & v_{22} & \dots & v_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{1n} & v_{2n} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix} \quad (911)$$

A matriz ρ é a transposta de v, ou seja,

$$\rho = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix} \tag{912}$$

Condição necessária e suficiente para que exista ρ^{-1} é que o determinante de ρ seja diferente de zero. Ora, uma condição suficiente para que o determinante de uma matriz seja não-nulo é que suas linhas sejam linearmente independentes. Como as linhas de ρ são os autovetores $\vec{v}_k$, conclui-se que uma condição suficiente para que exista ρ^{-1} é que os autovetores de A sejam linearmente independentes. Um corolário é que, se A é hermiteana, ela é diagonalizavel, pois o conjunto dos autovetores de uma matriz hermiteana forma uma base, o que significa que os autovetores são linearmente independentes.

Exemplo

Diagonalizar a matriz complexa[37]

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{913}$$

A equação secular (900) é, neste caso,

$$det\left\{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}\right\} = det\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \tag{914}$$

ou

$$\lambda^2 - 1 = 0 \tag{915}$$

cujas soluções são

$$\lambda = \pm 1 \tag{916}$$

Então a matriz, quando estiver na forma diagonal, será

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \qquad (917)$$

Contudo, vamos construir explicitamente a transformação de semelhança que leva A à forma diagonal. Para isso precisamos determinar os autovetores de A. Seus autovalores já foram determinados: são $\lambda_1 = +1$ e $\lambda_2 = -1$. Temos

Seja $\vec{v_i}$ o autovetor associado ao autovalor λ_i. Então,

$$A\vec{v_1} = \lambda_1 \vec{v_1} \qquad (918)$$

$$A\vec{v_2} = \lambda_2 \vec{v_2} \qquad (919)$$

Denotando o vetor $\vec{v_i}$ pela matriz coluna

$$\begin{pmatrix} (v_i)_1 \\ (v_i)_2 \end{pmatrix}$$

temos, para (920):

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (v_1)_1 \\ (v_1)_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (v_1)_1 \\ (v_1)_2 \end{pmatrix} \qquad (920)$$

Realizando o produto de matrizes do primeiro termo, temos

$$\begin{pmatrix} (v_1)_2 \\ (v_1)_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (v_1)_1 \\ (v_1)_2 \end{pmatrix} \qquad (921)$$

Como a igualdade de matrizes implica na igualdade, um a um, dos termos de mesmos índices, temos

$$(v_1)_2 = (v_1)_1 \qquad (922)$$

$$(v_1)_1 \quad = \quad (v_1)_2 \tag{923}$$

A solução mais geral dessas equações é a matriz coluna

$$\vec{v_1} = \begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix} \tag{924}$$

onde a é qualquer número diferente de zero. Esta ambiguidade era esperada, pois, pela linearidade dos operadores em questão, se $\vec{v}$ é um autovetor correspondendo a um determinado autovalor, qualquer múltiplo não-nulo seu também o é. Uma maneira de levantar a ambiguidade é exigir que o vetor seja normalizado. Isto se faz assim: o produto escalar de $\vec{v_1}$ consigo mesmo é

$$(a^*, a^*) \begin{pmatrix} a \\ a \end{pmatrix} = a^*a + a^*a = 2|a|^2 = 1 \tag{925}$$

Logo, devemos ter $a = \frac{1}{\sqrt{2}}$ (a fase, como sempre, é escolhida arbitrariamente). Portanto,

$$\vec{v_1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{926}$$

Um cálculo análogo leva a

$$\vec{v_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{927}$$

Note-se que

$$\vec{v_1}.\vec{v_2} = \frac{1}{2}(1,1) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 0 \tag{928}$$

que mostra que os autovetores são ortogonais, e, portanto, linearmente independentes. A matriz ρ procurada é, então,

$$\rho = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{929}$$

Como $det\rho = -1$, ela possui inversa, que é

$$\rho^{-1} = \rho \tag{930}$$

Resta mostrar que

$$\rho^{-1}A\rho = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{931}$$

De fato,

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{932}$$

Exercícios

1. Ache a equação secular (também chamada de equação característica) e os autovalores da matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

2. Mostre que a matriz

$$B = \begin{pmatrix} a & h \\ h & b \end{pmatrix}$$

é transformada em uma matriz diagonal

$$C = T_\theta B \left(T_\theta\right)^{-1}$$

onde T_θ é

$$T_\theta = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}$$

e

$$\tan 2\theta = \frac{2h}{a-b}$$

(transformação de Jacobi).

3. Determine os autovalores e autovetores da matriz

$$M = \begin{pmatrix} 2 & -2 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & -1 \end{pmatrix}$$

Resposta: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -2$, $\lambda_3 = 3$.

4. No caso $l = 1$, escreva a representação matricial l_x do operador $\hat{l}_x$ na base em que $\hat{l}_z$ é diagonal. (São os elementos de matriz que calculamos em aula). Determine a transformação de semelhança que diagonaliza l_x e exiba a matriz diagonalizada. Mostre que esta transformação de semelhança "desdiagonaliza" (perdão, Luis de Camões!) a matriz l_z.