

Por qué y cómo encontramos funciones de matrices: entropía en mecánica cuántica

B.M. Rodríguez-Lara, H.M. Moya-Cessa, and S.M. Viana

INAOE, Coordinación de Óptica

Apartado Postal 51/216, Puebla 72000, México

e-mail: bmlara@inaoep.mx, hmmc@inaoep.mx

Recibido el 29 de noviembre de 2004; aceptado el 31 de marzo de 2005

En muchas áreas de la ciencia y la tecnología modernas es muy común encontrar funciones de matrices cuadradas. El método analítico básico para encontrar dichas funciones se basa en la existencia de la forma normal —también conocida como forma generalizada de Jordan— para la matriz argumento; seguir este método es tedioso para la mayoría de los casos. En este comentario de enseñanza presentamos el método para encontrar funciones matriciales basado en matrices generalizadas de Jordan, y también un método analítico alternativo muy sencillo de implementar y aplicable a funciones que admitan desarrollo en series de Taylor. Como valor agregado se estudia su aplicación en el análisis de entropía cuántica para un sistema atómico de tres niveles en interacción con un campo cuantizado mono-modo.

Descriptores: Mecánica cuántica; entropía; funciones matriciales; forma normal o de Jordan; teorema de Cayley-Hamilton.

Finding matrix functions is a common occurrence in modern day research. The basic analytic method to calculate matrix functions is based in the existence of the generalized Jordan — or normal — form of the argument matrix; usually, this method is tedious or hard to follow. In this report we present the typical generalized Jordan form method and an alternative method, which is simpler and usable for smooth functions that accept a Taylor series expansion. As extra-value, we apply the method finding the entropy of a three-level system interacting with a quantized single-mode radiation field.

Keywords: Quantum Mechanics; entropy; matrix functions; Jordan or normal form; Cayley-Hamilton theorem.

PACS: 02.10.Sp; 02.20.Sv; 03.65.Sq; 42.15.Eq; 42.30.Kr

1. ¿Por qué funciones matriciales?

Encontrar funciones de matrices es de vital importancia en el quehacer científico de investigación de muy diversas especialidades. Uno de los temas más mencionados al respecto es encontrar la exponencial de una matriz cuadrada. Un ejemplo que requiere conocer la exponencial de una matriz lo encontramos al analizar sistemas diferenciales de procesos de tiempo continuo en teoría de control moderno [1]; en esta aplicación los resultados invariablemente recurren a la expresión $e^{\gamma \mathbb{A}t}$, donde γ es alguna constante y \mathbb{A} es una matriz compleja cuadrada. Otro ejemplo de este tipo lo podemos encontrar en el área de mecánica clásica, donde el análisis de trayectorias de puntos de masas cuya dinámica sea lineal en dos dimensiones da como resultado que las trayectorias sean descritas por la exponencial de una matriz de Hamilton aplicada a un vector de condiciones iniciales [2]. Generalmente la manera de enfrentar este problema —encontrar la exponencial de una matriz— consiste en desarrollar un método óptimo, específico para cada situación, pues las propiedades de la matriz dependen del tipo de problema. Por ejemplo, en el caso de teoría de control moderno el desarrollo de Silva [3]; en el área de mecánica clásica y óptica lineal el trabajo desarrollado por Wolf y presentado recientemente [4]. Los ejemplos antes mencionados son tan sólo un par entre la multitud de problemas que requieren encontrar la exponencial de una matriz. Pero las exponenciales de matrices no son las únicas funciones de matrices relevantes en la actividad de investigación. Por ello es de interés estudiar métodos para encontrar la

función de una matriz. En este artículo de enseñanza presentamos un par de métodos generales para encontrar una función de una matriz cuadrada finita, $f(\mathbb{A})$, siempre y cuando la función f sea bien comportada (suave y continua).

Además de los ejemplos mencionados anteriormente, en donde se requiere conocer la exponencial de una matriz, en la siguiente sección presentamos una breve discusión sobre la entropía como medidor de pureza de un estado en mecánica cuántica para el caso de sistemas atómicos de tres niveles. La definición de la entropía de un sistema cuántico como el logaritmo de la matriz de densidad del sistema nos da terreno para presentar un par de métodos para encontrar funciones de matrices. En la Sec. 3, con el fin de presentar un método para encontrar la función de una matriz con forma normal —o forma generalizada de Jordan— siempre y cuando se trate de una función bien comportada, comenzamos estudiando la construcción de transformaciones coordinadas que permiten obtener la forma generalizada de Jordan para matrices cuadradas, para luego calcular la función de dicha matriz en forma normal. Como se verá a lo largo del desarrollo de este primer método basado en la forma normal de una matriz, construir las transformaciones coordinadas puede volverse tedioso para sistemas de gran dimensión, por lo que en la Sec. 4 estudiamos un método más simple para encontrar la función —nuevamente si la función es bien comportada— de una matriz cuadrada cualquiera conociendo solamente los valores propios de la matriz argumento. Este nuevo método está basado en la aplicación del teorema de Cayley-Hamilton. Los conocimientos adquiridos en las Secs. 3 y 4 son luego

aplicados al problema de medir la pureza del estado de un sistema de tres niveles explicado en la segunda sección — utilizando el operador de entropía. Los resultados obtenidos a través del estudio del operador de entropía son comparados con la información dada por la función de pureza — una aproximación a la entropía de un sistema cuántico bastante conocida y usada. Finalmente presentamos una conclusión sobre los métodos presentados y los resultados obtenidos.

2. Entropía en mecánica cuántica

Al nivel que usaremos en este artículo es suficiente conocer los siguientes postulados de la mecánica cuántica [5] como antecedentes:

Postulado 1 Asociado a cualquier sistema físico cerrado y aislado de interacción con el entorno se encuentra un espacio vectorial complejo con producto interno —un espacio de Hilbert, \mathcal{H} — al que se le llama espacio de estados.

Una representación de este espacio de estados está dada por la notación de Dirac, donde un objeto llamado *ket*, $|\cdot\rangle$, representa un vector de estado en el espacio de Hilbert correspondiente. Otros elementos que complementan dicha notación son: un objeto llamado *bra*, $\langle\cdot|$, que representa el funcional perteneciente al espacio dual asociado al ket correspondiente; el objeto conocido como *braket*, $\langle\cdot|\cdot\rangle$, que representa el producto interno entre un bra y un ket; y el producto externo que es representado por el objeto *ketbra*, $|\cdot\rangle\langle\cdot|$. Es común representar a un ket como un vector columna, por lo tanto un braket será un número complejo y un ketbra una matriz compleja.

Asociado a un espacio de Hilbert existe un espacio de operadores lineales asociados, representado como $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Un operador perteneciente a este espacio puede definirse como una transformación lineal que, aplicada sobre un vector perteneciente a un espacio de Hilbert, regresa un vector perteneciente al mismo espacio de Hilbert:

$$\hat{O} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \quad \hat{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}). \quad (1)$$

Visto de otra forma,

$$\hat{O}|\psi\rangle = |\phi\rangle, \quad |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \hat{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}). \quad (2)$$

En este espacio de operadores lineales asociados al espacio de Hilbert podemos encontrar un operador en particular:

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|, \quad \hat{\rho} \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad (3)$$

que recibe el nombre de *operador estadístico*, pero es mejor conocido como *matriz de densidad* y tiene como función representar el estado de un sistema cuántico.

Cabe mencionar que los elementos del espacio de operadores lineales, $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, pueden representarse como matrices complejas cuadradas de dimensión afín al espacio de Hilbert correspondiente.

Postulado 2 La evolución temporal de un sistema físico cerrado responde a la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = \hat{H}|\psi\rangle, \quad (4)$$

donde el operador \hat{H} se conoce como operador de Hamilton y el vector $|\psi\rangle$ representa el estado del sistema.

Corolario 1 La evolución temporal de un sistema físico cerrado es descrita por una transformación unitaria:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}|\psi(0)\rangle. \quad (5)$$

Gracias al corolario 1 encontramos la primera aplicación de las funciones de matrices en mecánica cuántica: si queremos conocer la evolución temporal del estado de un sistema cuántico debemos conocer un operador de evolución que es justamente el exponencial de una matriz y aplicarlo sobre el estado inicial del sistema [Ec. (5)]. Pero la relevancia de las funciones de matrices no se queda aquí, como veremos a continuación.

En mecánica cuántica se definen estados puros y estados mezclados [5, 6]. Por ejemplo, si tenemos un sistema de tres niveles, $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$, donde $\langle j|k\rangle = \delta_{j,k}$, un estado puro puede escribirse como una función de onda normalizada:

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= a_1|1\rangle + a_2|2\rangle + a_3|3\rangle, \\ |\psi|^2 &= \langle\psi|\psi\rangle = \sum_{n=1}^3 |a_n|^2 = 1, \end{aligned} \quad (6)$$

donde las constantes $\{a_i\}$ son conocidas como amplitudes de probabilidad.

Para un estado mezclado la función de onda ya no puede ser invocada directamente, y es necesario recurrir a la matriz de densidad:

$$\hat{\rho}_M = p_0|0\rangle\langle 0| + p_1|1\rangle\langle 1| + p_2|2\rangle\langle 2|, \quad \sum_{j=0}^2 p_j = 1. \quad (7)$$

En la matriz de densidad las constantes $\{p_k\}$ representan la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|k\rangle$.

Definamos una base vectorial, a la que llamaremos estándar, para el espacio de Hilbert de dimensión tres asociado a nuestro sistema atómico de tres niveles:

$$|1\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |3\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (8)$$

Utilizando esta base estándar [Ec.(8)] podemos reescribir las matrices de densidad para un estado puro, [Ec.(6)] y un estado mezclado [Ec.(7)], respectivamente, como

$$\hat{\rho}_\psi = \begin{pmatrix} |a_0|^2 & a_0 a_1^* & a_0 a_2^* \\ a_1 a_0^* & |a_1|^2 & a_1 a_2^* \\ a_2 a_0^* & a_2 a_1^* & |a_2|^2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\hat{\rho}_M = \begin{pmatrix} |a_0|^2 & 0 & 0 \\ 0 & |a_1|^2 & 0 \\ 0 & 0 & |a_2|^2 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Si comparamos las matrices de densidad para un estado puro, [Ec.(9)] y la correspondiente para un estado mezclado [Ec.(10)] notamos una mayor cantidad de términos en la primera, cantidad que crece muy rápidamente en cuanto aumentamos el número de posibles niveles del sistema. Los términos extra que aparecen en la matriz de densidad de un estado puro son elementos no-diagonales y son estos elementos los que proveen información sobre la *coherencia* del sistema [5]. En la matriz de densidad que representa al estado mezclado [Ec.(10)] no existe coherencia entre los estados que la forman, por lo que los elementos no-diagonales son todos cero. Entonces, al tener elementos fuera de la diagonal diferentes de cero, la matriz de densidad nos informa que el sistema se encuentra en una superposición coherente de estados; en otras palabras, que existe coherencia entre los estados.

Los casos de las matrices de densidad antes mencionadas son casos extremos de estados puros y mezclados. Existe la posibilidad de tener estados parcialmente mezclados o parcialmente puros. Un operador que nos define muy bien el grado de pureza de un sistema es el operador de entropía, el cual se puede definir como

$$\hat{S} = -\ln(\hat{\rho}), \tag{11}$$

donde $\hat{\rho}$ es la matriz de densidad del sistema bajo análisis —un operador en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. Nuevamente necesitamos encontrar la función de una matriz para obtener información del estado del sistema, en este caso la pureza del mismo.

Para trabajar con un ejemplo concreto analicemos el valor promedio de la entropía del estado de un sistema cuántico conforme el estado evoluciona en el tiempo:

$$\langle \hat{S}(t) \rangle = \text{Tr}[-\hat{\rho}(t) \ln(\hat{\rho}(t))]. \tag{12}$$

Este valor promedio nos entrega información sobre qué tan puro es el estado del sistema. Para el caso de un estado puro el valor promedio de la entropía es cero, mientras que para un estado mezclado es diferente de cero.

Tomemos como nuestro caso particular de estudio un sistema de tres niveles interactuando con un modo cuantizado de radiación (Fig. 1); la función de Hamilton que describe la interacción del sistema de tres niveles con el campo cuantizado es

$$H = \omega \left(\hat{n} + \frac{1}{2} \right) + \sum_{i=1}^3 \tilde{\omega}_i |i\rangle \langle i| + \lambda_{12} (\hat{a}^\dagger |1\rangle \langle 2| + \hat{a} |2\rangle \langle 1|) + \lambda_{13} (\hat{a}^\dagger |1\rangle \langle 3| + \hat{a} |3\rangle \langle 1|), \tag{13}$$

donde la cantidad ω es la frecuencia del campo cuantizado, los valores $\tilde{\omega}_i = \omega_i + \chi_i \hat{n}$ las frecuencias relacionadas con cada transición atómica y los coeficientes λ_{ij} las constantes de acoplamiento entre el campo cuantizado y el sistema de tres niveles. La solución para un sistema descrito por esta función de Hamilton [Ec.(13)] es la función de onda

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+\frac{3}{2})t} (c_n(t)|n+1, 1\rangle + d_n(t)|n, 2\rangle + e_n(t)|n, 3\rangle), \tag{14}$$

donde los coeficientes de la función de onda, $\{c_n(t), d_n(t), e_n(t)\}$, responden a la ecuación de Schrödinger:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} c_n(t) \\ d_n(t) \\ e_n(t) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} \chi_1(n+1) & \lambda_{21}\sqrt{n+1} & \lambda_{31}\sqrt{n+1} \\ \lambda_{21}\sqrt{n+1} & \Delta_2 + \chi_2 n & 0 \\ \lambda_{31}\sqrt{n+1} & 0 & \Delta_3 \end{pmatrix}}_A \begin{pmatrix} c_n(t) \\ d_n(t) \\ e_n(t) \end{pmatrix}, \tag{15}$$

con el valor $\Delta_i = \omega_i - \omega_1$, con $i = 2, 3$, la frecuencia de transición entre el i -ésimo nivel y el nivel base, $|1\rangle$. La ecuación anterior [Ec.(15)] tiene una solución de la forma

$$\begin{pmatrix} c_n(t) \\ d_n(t) \\ e_n(t) \end{pmatrix} = e^{-i\Delta t} \begin{pmatrix} c_n(0) \\ d_n(0) \\ e_n(0) \end{pmatrix}, \tag{16}$$

donde $\{c_n(0), d_n(0), e_n(0)\}$ son las amplitudes de probabilidad para el estado inicial $|\psi(0)\rangle$. Para poder encontrar la evolución temporal de la función de onda de nuestro sistema debemos encontrar la exponencial de una matriz compleja cuadrada de tres por tres.

La solución a la ecuación de Schrödinger [Ec.(15)] nos permite escribir la función de onda [Ec. (14)] con la cual po-

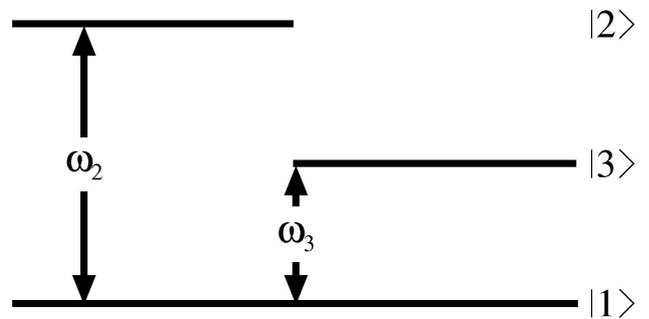


FIGURA 1. Diagrama esquemático para un sistema de tres niveles.

demos calcular la matriz de densidad del sistema completo —sistema atómico más campo—:

$$\hat{\rho} = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|. \quad (17)$$

Para poder calcular la entropía del sistema nos vamos a concentrar sólo en la parte atómica del sistema completo. Por lo tanto, en la matriz de densidad del sistema completo, trazaremos sobre los estados del campo. De esta manera obtenemos la matriz de densidad reducida para la parte atómica:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_C(\hat{\rho}) = \sum_{j=0}^N \langle j|\hat{\rho}|j\rangle. \quad (18)$$

El resultado de esta operación de reducción [Ec.(18)] nos entrega una matriz de tres por tres con la forma

$$\hat{\rho}_A = \sum_{n=0}^{\infty} \begin{pmatrix} |c_n|^2 & c_n d_{n+1}^* & c_n e_{n+1}^* \\ d_{n+1} c_n^* & |d_n|^2 & d_n e_n^* \\ e_n c_{n+1}^* & e_n d_n^* & |e_n|^2 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

con la cual podemos encontrar la operación del operador de entropía sobre el estado del sistema:

$$\hat{S}_{\hat{\rho}_A} = -\ln(\hat{\rho}_A). \quad (20)$$

Con el resultado anterior [Ec.(20)] podemos calcular el valor medio de la entropía [Ec.(12)].

Para obtener un resultado que podamos analizar —una gráfica del valor medio de la entropía [Ec.(12)] contra un eje temporal, por ejemplo— ahora necesitamos calcular el exponencial de una matriz compleja de tres por tres y el logaritmo de otra matriz compleja. Tal vez el operador de evolución [Ec.(5)] y el operador de entropía, [Ec.(11)] son tan sólo un par de los muchos operadores en mecánica cuántica que se definen como función de una matriz, pero en lo que nos concierne en este momento —el cálculo de este par de operadores (evolución y entropía)— es motivación suficiente para tratar de encontrar métodos analíticos para representar funciones de matrices, cosa que presentamos en las siguientes dos secciones.

3. Funciones matriciales: forma de generalizada de Jordan

Una de las formas utilizadas para encontrar la función de una matriz se remite a utilizar la forma generalizada de Jordan —o forma normal— de la matriz argumento. A continuación presentamos una breve revisión de conceptos fundamentales de algebra lineal [7] que nos permiten encontrar la forma normal de una matriz cuadrada. Cada teorema presentado es seguido por una breve demostración que presenta un método para llevar una matriz compleja cuadrada a su forma normal.

Teorema 1 *Si el polinomio característico de una matriz cuadrada de dimensión N tiene N ceros distintos, entonces la matriz se puede reducir a una forma diagonal en un sistema coordinado apropiado.*

Para mostrar esto tomemos una matriz cuadrada de $N \times N$, \mathbb{A} , cuyos valores propios sean $\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N\}$ y sus vectores propios $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_N\}$. Ahora construyamos una matriz de transformación donde cada columna sea uno de los vectores propios de \mathbb{A} :

$$\mathbb{U} = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_N). \quad (21)$$

Una representación para la inversa de esta transformación, está dada por

$$\mathbb{U}^{-1} = (\vec{u}_1^{-1T}, \vec{u}_2^{-1T}, \dots, \vec{u}_N^{-1T})^T, \quad (22)$$

donde \vec{u}_m^{-1} representa el inverso del vector propio \vec{u}_m , tal que $(\vec{u}_m, \vec{u}_n) = \vec{u}_m^{-1T} \vec{u}_n = \delta_{m,n}$. Con la transformación coordenada [Ec.(21) y (22)] la matriz original \mathbb{A} en las nuevas coordenadas resulta

$$\begin{aligned} \mathbb{D} &= \mathbb{U}^{-1} \mathbb{A} \mathbb{U} \\ &= \mathbb{U}^{-1} (\mathbb{A} \vec{u}_1, \mathbb{A} \vec{u}_2, \dots, \mathbb{A} \vec{u}_N) \\ &= \begin{pmatrix} \vec{u}_1^{-1} \\ \vec{u}_2^{-1} \\ \vdots \\ \vec{u}_N^{-1} \end{pmatrix} (\lambda_1 \vec{u}_1, \lambda_2 \vec{u}_2, \dots, \lambda_N \vec{u}_N) \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_N \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (23)$$

que es una forma diagonal.

Teorema 2 *Una matriz cuadrada de dimensión N cuyo polinomio característico tiene N ceros iguales puede ser llevada a una forma de Jordan.*

Contamos con un largo siglo de investigación y trabajos sobre formas de Jordan para ayudarnos en esto, pero una forma simple de mostrar este teorema consiste en empezar con una matriz cuadrada de $N \times N$, \mathbb{B} , tal que su conjunto de valores propios es tan sólo $\{\lambda\}$ y construir un conjunto de vectores, $\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_N\}$, que cumplan

$$\mathbb{B} \vec{u}_1 = \lambda_1 \vec{u}_1, \quad (25)$$

$$\mathbb{M}_B \vec{u}_2 = \vec{u}_1, \quad (26)$$

$$\mathbb{M}_B \vec{u}_3 = \vec{u}_2, \quad (27)$$

$$\vdots \quad (28)$$

$$\mathbb{M}_B \vec{u}_n = \vec{u}_{n-1}, \quad (29)$$

donde utilizamos una matriz auxiliar cuadrada \mathbb{M}_B que debe tener inversa y ser definida tal que $\mathbb{M}_B = \mathbb{B} - \lambda \mathbb{I}$, donde \mathbb{I} es la matriz identidad de dimensión N .

Nuevamente construimos una matriz de transformación lineal cuyas columnas sean los vectores antes mencionados [Ecs.(25)-(29)]:

$$\mathbb{U} = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_n). \quad (30)$$

y transformamos a la matriz \mathbb{B} al nuevo sistema coordenado dado por \mathbb{U} [Ec.(30)]:

$$\begin{aligned} \mathbb{J} &= \mathbb{U}^{-1}\mathbb{B}\mathbb{U} \\ &= \mathbb{U}^{-1}(\mathbb{B}\vec{u}_1, \mathbb{B}\vec{u}_2, \dots, \mathbb{B}\vec{u}_n) \\ &= \mathbb{U}^{-1}(\lambda\vec{u}_1, \vec{u}_1 + \lambda\vec{u}_2, \dots, \vec{u}_{n-1} + \lambda\vec{u}_n) \\ &= \begin{pmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{31}$$

La matriz \mathbb{J} [Eq(31)] presenta una forma triangular superior donde el valor propio se repite a lo largo de la diagonal y a su derecha se encuentra una diagonal que repite el número uno; ésta es conocida como forma de Jordan o forma normal.

Hasta este instante tenemos en nuestras manos la manera de encontrar las formas diagonal para matrices no-degeneradas y la forma de Jordan para matrices completamente degeneradas; éstos son los dos casos extremos de matrices. Toca ahora encontrar una forma de llevar una matriz parcialmente degenerada a su forma generalizada de Jordan.

Corolario 2 Una matriz cuadrada de dimensión N cuyo polinomio característico tiene algunos ceros distintos y algunos iguales puede ser llevada a una forma diagonal de bloque donde los bloques tendrán forma diagonal o forma de Jordan (forma de Jordan generalizada).

Para mostrar el corolario 2 tomemos una matriz cuadrada de $N \times N$, \mathbb{C} , tal que sus valores propios están dados por el conjunto:

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \underbrace{\lambda_k, \dots, \lambda_{k+m-1}}_m, \lambda_{k+m}, \dots, \lambda_n\}, \lambda_k = \lambda_{k+1} = \dots = \lambda_{k+m-1}, \tag{32}$$

donde hemos supuesto el caso más simple de un sólo valor propio degenerado.

Para la matriz \mathbb{C} podemos construir un conjunto de vectores que agrupe un par de subconjuntos: el de los vectores propios para los valores propios diferentes —como en el caso de una matriz no-degenerada, teorema 1— y varios subconjuntos de vectores asociados cada uno de ellos a uno de los valores propios que se repite —cada uno de estos últimos subconjuntos es construido como en el caso de una matriz completamente degenerada, teorema 2. Por ejemplo:

$$\{\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_k, \vec{u}_{k+1}, \vec{u}_{k+2}, \dots, \vec{u}_{k+m}, \vec{u}_{k+m+1}, \dots, \vec{u}_n\}, \tag{33}$$

donde seguimos trabajando con el caso de un sólo valor propio degenerado.

Nuevamente construimos matrices de transformación a partir de este conjunto de vectores siguiendo los ejemplos mencionados anteriormente [Ecs.(21) y (30)] y encontramos

la transformación para la matriz \mathbb{C} :

$$\begin{aligned} \mathbb{C}' &= \mathbb{U}^{-1}\mathbb{C}\mathbb{U} \\ &= \mathbb{U}^{-1}(\mathbb{B}\vec{u}_1, \mathbb{B}\vec{u}_2, \dots, \mathbb{B}\vec{u}_k, \dots, \mathbb{B}\vec{u}_n) \\ &= \mathbb{U}^{-1}(\lambda_1\vec{u}_1, \lambda_2\vec{u}_2, \dots, \lambda\vec{u}_k, \vec{u}_k + \lambda\vec{u}_{k+1}, \dots, \lambda_n\vec{u}_n) \\ &= \begin{pmatrix} \mathbb{D}_1 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbb{J} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbb{D}_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{34}$$

A esta matriz \mathbb{C} [Ec.(34)] se le conoce como *matriz generalizada de Jordan*. Los bloques componentes de \mathbb{C} tienen la forma diagonal o normal correspondiente para el tipo de bloque no-degenerado o completamente degenerado, en este ejemplo:

$$\mathbb{D}_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_{k-1} \end{pmatrix}, \tag{35}$$

$$\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \lambda_k & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_k & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_k \end{pmatrix}, \tag{36}$$

$$\mathbb{D}_2 = \begin{pmatrix} \lambda_{k+m+1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_{k+m+2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{pmatrix}. \tag{37}$$

Ahora contamos con un método para encontrar la forma generalizada de Jordan para una matriz cualquiera. Podemos entonces atacar el problema que nos concierne: encontrar la función de una matriz cuadrada de $N \times N$, \mathbb{A} , siempre y cuando la función sea bien comportada.

Para encontrar la función de una matriz cuadrada, $f(\mathbb{T})$, podemos recurrir al desarrollo en series de potencias de la función f , en particular a la serie de McLaurin:

$$f(\mathbb{T}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \mathbb{T}^m. \tag{38}$$

Supongamos que la matriz argumento, \mathbb{T} , se trata de una matriz con forma diagonal y, por lo tanto, la llamamos \mathbb{D} . Es fácil darse cuenta que la m -ésima potencia de dicha matriz está dada por:

$$\mathbb{D}^m = \begin{pmatrix} \lambda_1^m & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^m & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda_N^m \end{pmatrix}. \tag{39}$$

Entonces encontrar la función matricial para una matriz diagonal \mathbb{D} aplicando el desarrollo en series de potencias de la función requerida [Ec.(38)] resulta:

$$\begin{aligned}
 f(\mathbb{D}) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \mathbb{D}^m = \begin{pmatrix} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \lambda_1^m & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \lambda_2^m & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \lambda_N^m \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} f(\lambda_1) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & f(\lambda_2) & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & f(\lambda_N) \end{pmatrix}, \tag{40}
 \end{aligned}$$

donde $f^{(n)}$ denota $\partial^{(n)} f / \partial \lambda^{(n)}$.

Mientras tanto, para una matriz con forma de Jordan —a la que llamaremos \mathbb{J} — puede mostrarse fácilmente por inducción que la m -ésima potencia es una matriz triangular superior que posee la forma

$$\mathbb{J}^m = \begin{pmatrix} \lambda^m & \frac{d\lambda^m}{d\lambda} & \frac{1}{2!} \frac{d^2\lambda^m}{d\lambda^2} & \frac{1}{3!} \frac{d^3\lambda^m}{d\lambda^3} & \dots & \frac{1}{(n-1)!} \frac{d^{n-1}\lambda^m}{d\lambda^{n-1}} \\ 0 & \lambda^m & \frac{d\lambda^m}{d\lambda} & \frac{1}{2!} \frac{d^2\lambda^m}{d\lambda^2} & \dots & \frac{1}{(n-2)!} \frac{d^{n-2}\lambda^m}{d\lambda^{n-2}} \\ 0 & 0 & \lambda^m & \frac{d\lambda^m}{d\lambda} & \dots & \frac{1}{(n-3)!} \frac{d^{n-3}\lambda^m}{d\lambda^{n-3}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda^m \end{pmatrix}. \tag{41}$$

Por lo tanto, el desarrollo en serie de potencias [Ec.(38)] para este caso nos presenta el resultado

$$\begin{aligned}
 f(\mathbb{J}) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \mathbb{J}^m = \begin{pmatrix} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \lambda^m & \sum_{m=1}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \frac{d\lambda^m}{d\lambda} & \dots & \sum_{m=n}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \frac{d^{n-1}\lambda^m}{d\lambda^{n-1}} \\ 0 & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda^n & \dots & \sum_{m=n-1}^{\infty} \frac{f^{(m)}(0)}{m!} \frac{d^{n-2}\lambda^m}{d\lambda^{n-2}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \lambda^n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{1}{2!} f''(\lambda) & \frac{1}{3!} f'''(\lambda) & \dots & \frac{1}{(n-1)!} f^{(n-1)}(\lambda) \\ 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) & \frac{1}{2!} f''(\lambda) & \dots & \frac{1}{(n-2)!} f^{(n-2)}(\lambda) \\ 0 & 0 & f(\lambda) & f'(\lambda) & \dots & \frac{1}{(n-3)!} f^{(n-3)}(\lambda) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f(\lambda) \end{pmatrix}. \tag{42}
 \end{aligned}$$

Finalmente, para una matriz cuadrada cualquiera \mathbb{C} que puede ser transformada en una matriz con forma diagonal de bloques —como la presentada en el caso del corolario 2— podemos escribir la función de dicha matriz como

$$\begin{aligned}
 f(\mathbb{C}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \mathbb{C}^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \mathbb{U} \mathbb{C}^n \mathbb{U}^{-1} = \mathbb{U} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} \mathbb{C}^n \right) \mathbb{U}^{-1} \\
 &= \mathbb{U} \begin{pmatrix} f(\mathbb{D}_1) & 0 & 0 \\ 0 & f(\mathbb{J}) & 0 \\ 0 & 0 & f(\mathbb{D}_2) \end{pmatrix} \mathbb{U}^{-1}. \tag{43}
 \end{aligned}$$

Para llegar al resultado anterior [Ec.(43)] hemos utilizado los métodos presentados en teorema 1, teorema 2 y corolario 2.

Así contamos con un método para encontrar la función de una matriz cuadrada cualquiera [Ec.(43)] siempre y cuando se trate de una función bien comportada. Para terminar el cálculo de la función de una matriz cualquiera, $f(\mathbb{C})$, sólo corresponde tomar el resultado presentado en la Ec.(43) y aplicar las formas encontradas para calcular la función de una matriz diagonal [Ec.(40)] y la función de una matriz normal [Ec.(42)]. Cabe notar que este método, si bien es de fácil entendimiento, es de difícil aplicación pues el cálculo de las matrices de transformación coordenada que se necesitan para encontrar la función de una matriz requiere de encontrar los valores propios de dicha matriz argumento, los vectores de estado propios asociados a los valores propios no-degenerados y vectores asociados a los valores propios degenerados del sistema, lo cual es tedioso y de considerable dificultad para matrices de dimensión mayor a dos.

4. Funciones matriciales: Cayley-Hamilton-Vandermonde

Para evitar la construcción de las transformaciones coordenadas de la sección anterior podemos echar un vistazo al método propuesto por Vidyasagar [8], que utiliza simplemente los valores propios de una matriz cuadrada para encontrar el exponencial de dicha matriz, y generalizarlo para cualquier función que admita una expansión en serie de Taylor.

Iniciemos recordando el *teorema de Cayley-Hamilton* que será la base de los desarrollos a utilizar:

Teorema 3 *Supongamos que V es un espacio vectorial complejo y que $\mathbb{T} \in \mathcal{L}(V)$. Sea $p(\lambda_i) = \det(\mathbb{T} - \lambda_i \mathbb{I})$ el polinomio característico de \mathbb{T} , entonces $p(\mathbb{T}) = 0$.*

Para nuestro primer caso tomemos nuevamente una matriz cuadrada no-degenerada de dimensión N , \mathbb{A} . Su polinomio característico se puede escribir como

$$p(\lambda) = \sum_{n=0}^N \alpha'_n \lambda^n = 0, \quad \alpha'_N = 1. \quad (44)$$

Al aplicar el teorema de Cayley-Hamilton (teorema 3) para la matriz \mathbb{A} resulta

$$p(\mathbb{A}) = \sum_{n=0}^N \alpha'_n \mathbb{A}^n = \sum_{n=0}^{N-1} \alpha'_n \mathbb{A}^n + \mathbb{A}^N = 0, \quad (45)$$

lo que nos permite escribir la N -ésima potencia de la matriz \mathbb{A} como

$$\mathbb{A}^N = - \sum_{n=0}^{N-1} \alpha_n \mathbb{A}^n, \quad (46)$$

donde $\alpha_j = -\alpha'_j$. Si queremos encontrar potencias de orden superior a N es claro que podemos calcular, por ejemplo,

$$\begin{aligned} \mathbb{A}^{N+1} &= \mathbb{A} \mathbb{A}^N \\ &= \alpha_0 \mathbb{A} + \alpha_1 \mathbb{A}^2 + \dots + \alpha_{N-2} \mathbb{A}^{N-1} + \alpha_{N-1} \mathbb{A}^N \\ &= \sum_{n=0}^{N-2} \alpha_n \mathbb{A}^{n+1} + \alpha_{N-1} \sum_{n=0}^{N-1} \alpha_n \mathbb{A}^n = \sum_{n=0}^{N-1} \beta_n^{(1)} \mathbb{A}^n. \end{aligned} \quad (47)$$

Si siguiendo para \mathbb{A}^{N+m} con $m = 2, 3, \dots$ se puede llegar por inducción a la ecuación

$$\mathbb{A}^{N+m} = \sum_{n=0}^{N-1} \beta_n^{(m)} \mathbb{A}^n \quad \forall m \geq 0, \quad (48)$$

donde la constantes $\{\beta_n^{(m)}\}$, con $n = 0, 1, \dots, N-1$, son funciones de las constantes $\{\alpha_j\}$ con $j = 0, 1, \dots, N$: $\beta_n^{(m)} = \beta_n^{(m)}(\alpha_0, \dots, \alpha_N)$. Más adelante se verá que la forma de dichas constantes $\{\beta_n^{(m)}\}$ es irrelevante para nuestros fines.

El objetivo nuevamente es encontrar la función de una matriz cuadrada, \mathbb{A} , siempre que dicha función sea bien comportada y admita un desarrollo en serie de potencias. Utilizando el recién demostrado hecho de que la $N + m$ -ésima potencia de una matriz cuadrada de dimensión N , $m \geq 0$, puede ser escrita como una suma finita de potencias inferiores a N de la misma matriz [Ecs.(46) y (48)] podemos escribir el desarrollo en serie de McLaurin [Ec.(38)] de dicha matriz como

$$\begin{aligned} f(\mathbb{A}) &= \sum_{n=0}^{\infty} c'_n \mathbb{A}^n = \sum_{n=0}^{N-1} c'_n \mathbb{A}^n + c'_N \mathbb{A}^N + \sum_{m=1}^{\infty} c'_{N+m} \mathbb{A}^{N+m} \\ &= \sum_{n=0}^{N-1} c'_n \mathbb{A}^n + c'_N \sum_{n=0}^{N-1} \alpha_n \mathbb{A}^n \\ &+ \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{N-1} c'_{N+m} \beta_n^{(m)} \mathbb{A}^n = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \mathbb{A}^n. \end{aligned} \quad (49)$$

Si siguiendo los mismos pasos realizados sobre la matriz matriz \mathbb{A} , y que nos llevan a los resultados de las ecuaciones Ecs.(46) y (48), pero reemplazando \mathbb{A} por cada uno de sus valores propios, λ_i , se obtiene que

$$f(\lambda_i) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \lambda_i^n. \quad (50)$$

La representación matricial para esta ecuación [Ec.(50)] se escribe

$$\begin{pmatrix} f(\lambda_1) \\ \vdots \\ f(\lambda_N) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \lambda_1 & \dots & \lambda_1^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \lambda_N & \dots & \lambda_N^{N-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}. \quad (51)$$

De la ecuación anterior [Ec.(51)] se puede reconocer la matriz de Vandermonde:

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1^{N-1} & \lambda_2^{N-1} & \dots & \lambda_N^{N-1} \end{pmatrix}, \quad (52)$$

cuyas propiedades incluyen tener una inversa existente [9]. Por lo tanto, la ecuación [Ec.(51)] tiene solución:

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \begin{pmatrix} f(\lambda_1) \\ \vdots \\ f(\lambda_N) \end{pmatrix},$$

$$\vec{c} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \vec{f}(\lambda). \tag{53}$$

Conociendo los coeficientes c_i , podemos entonces hallar la función $f(\mathbb{A})$ según la Ec.(49). Con esto, nos damos cuenta de que realmente es irrelevante preocuparnos por la forma de las constantes $\{\beta_n^{(m)}\}$ que aparecen en la Ec.(48). Para encontrar la función de una matriz cuadrada no-degenerada solamente debemos conocer los valores propios de dicha matriz.

Ahora consideremos una una matriz cuadrada completamente degenerada de dimensión N , \mathbb{B} , con valor propio λ_0 . El polinomio característico de este sistema tiene la forma

$$p(\lambda) = (\lambda - \lambda_0)^N = 0. \tag{54}$$

Utilizando el teorema de Cayley-Hamilton podemos reescribir el polinomio característico para la matriz \mathbb{B} :

$$p(\mathbb{B}) = \sum_{n=0}^N \alpha'_n \mathbb{B}^n,$$

$$0 = \mathbb{B}^N + \sum_{n=0}^{N-1} \alpha'_n \mathbb{B}^n, \tag{55}$$

donde los coeficientes $\{\alpha'_n\}$ con $n = 0, 1, \dots, N$ son coeficientes binomiales,

$$\alpha'_n = \binom{N}{n}.$$

Entonces podemos escribir nuevamente la $N + m$ -ésima potencia de una matriz, $m \geq 0$, como la suma finita de potencias inferiores a N de la misma matriz [Ecs.(46) y (48)] pero ahora para el caso completamente degenerado:

$$\mathbb{B}^N = \sum_{n=0}^{N-1} \alpha_n \mathbb{B}^n, \quad \alpha_n = - \binom{N}{n}, \tag{56}$$

$$\mathbb{B}^{N+m} = \sum_{n=0}^{N-1} \beta_n^{(m)} \mathbb{B}^n \quad \forall m \geq 0. \tag{57}$$

Con la ayuda de los resultados anteriores [Ecs.(56) y (57)] podemos escribir el desarrollo en serie de McLaurin para una función de la matriz \mathbb{B} :

$$f(\mathbb{B}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \mathbb{B}^n. \tag{58}$$

El problema es que ahora la expresión para el autovalor degenerado,

$$f(\lambda_0) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \lambda_0^n, \tag{59}$$

no entrega los coeficientes $\{c_n\}$ requeridos para encontrar la función de la matriz \mathbb{B} [Ec.(58)] por lo que debemos buscar una forma alternativa de encontrar dichos coeficientes. La respuesta viene en la forma de las derivadas de la Ec. (59):

$$f(\lambda_0) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \lambda_0^n \tag{60}$$

$$\frac{df(\lambda_0)}{d\lambda_0} = \sum_{n=0}^{N-1} c_n n \lambda_0^{n-1} \tag{61}$$

$$\vdots \tag{62}$$

$$\frac{d^{N-1} f(\lambda_0)}{d\lambda_0^{N-1}} = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \frac{d^{N-1} \lambda_0^n}{d\lambda_0^{N-1}} \tag{63}$$

En forma matricial el sistema de ecuaciones anterior [Ec.(60) - (63)] queda como

$$\begin{pmatrix} f(\lambda) \\ \vdots \\ f^{(N-1)}(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \lambda & \dots & \lambda^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \frac{d^{N-1} \lambda}{d\lambda^{N-1}} & \dots & \frac{d^{N-1} \lambda^{N-1}}{d\lambda^{N-1}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix}. \tag{64}$$

La ecuación anterior [Ec.(64)] tiene solución

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \begin{pmatrix} f(\lambda_0) \\ \vdots \\ f^{(N-1)}(\lambda_0) \end{pmatrix}, \tag{65}$$

con $f^{(n)} = d^n f / d\lambda^n$ y \mathbb{V} la matriz de Vandermonde para el caso de N raíces iguales, que tiene forma triangular superior.

Ahora contamos con un método para encontrar la función de una matriz no-degenerada y la función de una matriz completamente degenerada utilizando solamente los valores propios de la matriz argumento; falta generalizar el método para calcular la función de una matriz degenerada cualquiera. Por lo tanto, tomemos una matriz cuadrada de dimensión N , \mathbb{C} , con un conjunto de valores propios:

$$\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \underbrace{\lambda_k, \dots, \lambda_{k+m-1}}_m, \lambda_{k+m}, \dots, \lambda_n\} \tag{66}$$

podemos usar las Ecs.(51) y (64) para construir una matriz de Vandermonde con forma

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & \dots & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 & \dots & 1 \\ \lambda_1 & \dots & \lambda_k & 1 & \dots & \frac{d^{m-1}\lambda_k}{d\lambda_k^{m-1}} & \lambda_{k+m+1} & \dots & \lambda_n \\ \lambda_1^2 & \dots & \lambda_k^2 & \frac{d\lambda_k^2}{d\lambda_k} & \dots & \frac{d^{m-1}\lambda_k^2}{d\lambda_k^{m-1}} & \lambda_{k+m+1}^2 & \dots & \lambda_n^2 \\ \vdots & \vdots \\ \lambda_1^{N-1} & \dots & \lambda_k^{N-1} & \frac{d\lambda_k^{N-1}}{d\lambda_k} & \dots & \frac{d^{m-1}\lambda_k^{N-1}}{d\lambda_k^{m-1}} & \lambda_{k+m+1}^{N-1} & \dots & \lambda_n^{N-1} \end{pmatrix} \quad (67)$$

que nos ayude a encontrar una serie de coeficientes

$$\begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_k \\ \vdots \\ c_{k+m} \\ c_{k+m+1} \\ \vdots \\ c_{N-1} \end{pmatrix} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \begin{pmatrix} f(\lambda_1) \\ \vdots \\ f(\lambda_k) \\ \vdots \\ f^{(m-1)}(\lambda_{k+m}) \\ f(\lambda_{k+m+1}) \\ \vdots \\ f(\lambda_N) \end{pmatrix}, \quad (68)$$

para poder utilizar en la expresión en serie de potencias de la función matricial

$$f(\mathbb{A}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \mathbb{A}^n. \quad (69)$$

Las demostraciones de esta sección nos permiten formular un teorema:

Teorema 4 *Sea V un espacio vectorial complejo y f una función bien comportada que admita desarrollo en serie de Taylor. Entonces $f(\mathbb{A}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \mathbb{A}^n$ para $\mathbb{A} \in L(V)$, con coeficientes $\vec{c} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \vec{f}(\lambda)$, $\mathbb{V} \in L(V)$ la matriz de Vandermonde asociada a \mathbb{A}*

Con esto obtenemos un método más simple para encontrar la función de una matriz cuadrada que el presentado en la tercera sección utilizando formas generalizadas de Jordan. En este caso solamente debemos conocer los valores propios de la matriz argumento y no necesitamos construir ningún tipo de vectores propios o auxiliares para la transformación al sistema de coordenadas donde la matriz argumento tenga una forma normal generalizada, por lo cual el trabajo es considerablemente menor.

5. Entropía en mecánica cuántica: resultados numéricos

En este momento tenemos las herramientas suficientes para retomar el problema planteado en la Sec. 3 de este artículo: encontrar el valor medio de entropía para un sistema de tres niveles conforme evoluciona temporalmente en interacción con un campo cuantizado. Para lograr nuestro objetivo iniciemos colocando una serie de restricciones sobre nuestro sistema: primero consideremos que las constantes de acoplamiento entre los dos niveles excitados del sistema atómico

con el campo cuantizado sean iguales, $\lambda_{21} = \lambda_{31} = \lambda = \omega/2$; también supongamos que la frecuencia no depende del número de fotones que hay en el modo del campo, $\chi_i = 0$; y consideremos que el sistema esta en resonancia salvo por la transición entre el estado base y el tercer nivel, $\Delta_2 = 0$, $\Delta_3 = 2\omega$. La Fig. 2 muestra una representación gráfica de dicho sistema. Además tomemos como estado inicial un estado coherente del campo y el sistema atómico en el tercer nivel de tal forma que podamos escribirlo como

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle_{\text{campo}} \otimes |3\rangle_{\text{atomo}}. \quad (70)$$

Con un estado coherente del campo cuantizado definido como

$$|\alpha\rangle_{\text{campo}} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{e^{-|\alpha|^2/2} \alpha^j}{\sqrt{j!}} |j\rangle. \quad (71)$$

De tal manera, teniendo en cuenta las ecuaciones [Ecs.(14) y (15)] podemos escribir el vector de amplitudes de estado inicial y la matriz auxiliar \mathbb{A} de la ecuación de evolución [Ec.(15)] como

$$\begin{pmatrix} c_n(0) \\ d_n(0) \\ e_n(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ e^{|\alpha|^2/2} \alpha^n / \sqrt{n!} |n\rangle \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\omega}{2} \sqrt{n+1} & \frac{\omega}{2} \sqrt{n+1} \\ \frac{\omega}{2} \sqrt{n+1} & 0 & 0 \\ \frac{\omega}{2} \sqrt{n+1} & 0 & 2\omega \end{pmatrix}. \quad (72)$$

Como ya vimos en la Sec. 3 la solución [Ec.(16)] tiene la forma

$$\begin{pmatrix} c_n(t) \\ d_n(t) \\ e_n(t) \end{pmatrix} = e^{-i\mathbb{A}t} \begin{pmatrix} c_n(0) \\ d_n(0) \\ e_n(0) \end{pmatrix}.$$

Consideremos los valores propios de la matriz \mathbb{A} como $\{a_1, a_2, a_3\}$. Utilizamos el teorema 4 presentado en la sección cuatro que nos dice que podemos representa una función suave y continua de una matriz cuadrada de dimensión N como la suma finita de potencias inferiores a N [Ec.(69)]. Entonces podemos escribir el exponencial de la matriz \mathbb{A} como

$$e^{-i\mathbb{A}t} = \sum_{n=0}^{N-1} x_n \mathbb{A}^n = x_0 \mathbb{I} + x_1 \mathbb{A} + x_2 \mathbb{A}^2, \quad (73)$$

donde los coeficientes $\{x_k\}$ están dados por

$$\vec{x} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \vec{f}(a), \quad (74)$$

donde el vector $\vec{x} = (x_0, x_1, x_2)$ es el vector de coeficientes, la matriz \mathbb{V} es la matriz de Vandermonde asociada a \mathbb{A} y el vector $\vec{f}(a)$ el vector de funciones asociado a \mathbb{A} . En el caso de que la matriz argumento \mathbb{A} sea no-degenerada —es decir, $a_1 \neq a_2, a_1 \neq a_3, a_2 \neq a_3$ — la matriz de Vandermonde y el vector de funciones toman la forma

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ a_1^2 & a_2^2 & a_3^2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(a) = \begin{pmatrix} e^{-ia_1 t} \\ e^{-ia_2 t} \\ e^{-ia_3 t} \end{pmatrix}. \quad (75)$$

Para la matriz \mathbb{A} , una matriz completamente degenerada, $a_1 = a_2 = a_3$, la matriz de Vandermonde y el vector de funciones se escriben

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ a_1 & 1 & 0 \\ a_1^2 & 2a_1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(a) = \begin{pmatrix} e^{-ia_1 t} \\ -ite^{-ia_1 t} \\ -t^2 e^{-ia_1 t} \end{pmatrix}. \quad (76)$$

Finalmente, si la matriz \mathbb{A} se trata de un caso parcialmente degenerado, $a_1 \neq a_2, a_2 = a_3$, podemos escribir la matriz de Vandermonde y el vector de funciones como

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ a_1 & a_2 & 1 \\ a_1^2 & a_2^2 & 2a_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(a) = \begin{pmatrix} e^{-ia_1 t} \\ e^{-ia_2 t} \\ -ite^{-ia_2 t} \end{pmatrix}. \quad (77)$$

Es fácil escribir un programa que encuentre los valores propios de la matriz \mathbb{A} , verifique el tipo de matriz \mathbb{A} —no-degenerada, completamente degenerada, parcialmente degenerada— y encuentre las amplitudes de probabilidad dependientes del tiempo $\{c_n(t), d_n(t), e_n(t)\}$ según sea el caso. Con las amplitudes de probabilidad se puede calcular la matriz de densidad reducida [Ec. (18)]:

$$\hat{\rho}_A = \sum_{n=0}^{\infty} \begin{pmatrix} |c_n|^2 & c_n d_{n+1}^* & c_n e_{n+1}^* \\ d_{n+1} c_n^* & |d_n|^2 & d_n e_n^* \\ e_n c_{n+1}^* & e_n d_n^* & |e_n|^2 \end{pmatrix}, \quad (78)$$

con la cual podemos hallar la entropía del sistema:

$$\hat{S}_{\hat{\rho}_A} = -\ln(\hat{\rho}_A). \quad (79)$$

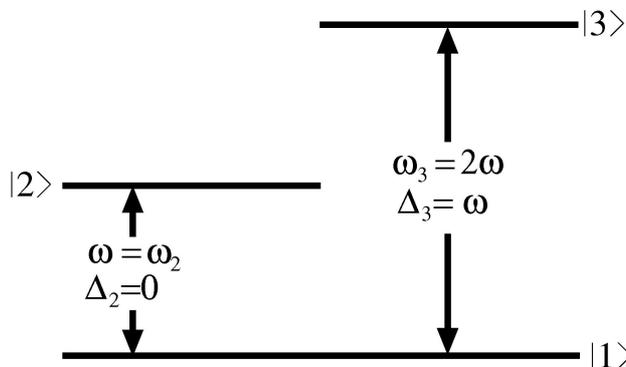


FIGURA 2. Diagrama esquemático para el sistema de tres niveles a considerar en nuestro problema de interacción con un campo cuantizado.

Nuevamente nuestro programa debe encontrar los valores propios de otra matriz —ahora la matriz de densidad reducida. Con los valores propios de la matriz de densidad reducida debemos analizar el tipo de matriz del que se trata —no-degenerada, degenerada o completamente degenerada— y calcular el logaritmo de ella según la ecuación

$$\ln(\hat{\rho}) = y_0 \mathbb{I} + y_1 \hat{\rho}_A + y_2 \hat{\rho}_A^2, \quad (80)$$

con ecuación de coeficientes

$$\vec{y} = \mathbb{V}^{T^{-1}} \vec{f}(r), \quad (81)$$

donde las opciones de la matriz de Vandermonde, \mathbb{V} , y el vector de funciones, $\vec{f}(r)$, asociados a $\hat{\rho}_A$ para encontrar el vector de coeficientes, $\vec{y} = (y_0, y_1, y_2)$, son: en el caso no-degenerado, $r_1 \neq r_2, r_1 \neq r_3, r_2 \neq r_3$,

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ r_1 & r_2 & r_3 \\ r_1^2 & r_2^2 & r_3^2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(r) = \begin{pmatrix} \ln(r_1) \\ \ln(r_2) \\ \ln(r_3) \end{pmatrix}. \quad (82)$$

En el caso completamente degenerado, $r_1 = r_2 = r_3$,

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ r_1 & 1 & 0 \\ r_1^2 & 2r_1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(r) = \begin{pmatrix} \ln(r_1) \\ \frac{1}{r_1} \\ -\frac{1}{r_1^2} \end{pmatrix}. \quad (83)$$

Y en el caso parcialmente degenerado, $r_1 \neq r_2, r_2 = r_3$,

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ r_1 & r_2 & 1 \\ r_1^2 & r_2^2 & 2r_2 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(r) = \begin{pmatrix} \ln(r_1) \\ \ln(r_2) \\ \frac{1}{r_1} \end{pmatrix}. \quad (84)$$

En el tratamiento anterior consideramos que la matriz de densidad reducida $\hat{\rho}_A$ posee valores propios dados por el conjunto $\{r_1, r_2, r_3\}$ y entonces utilizamos el teorema 4 para escribir el logaritmo de la matriz de densidad [Ec.(80)] y su ecuación de coeficientes [Ec.(81)] para los casos de matriz no-degenerada, Ec.(82), completamente degenerada, Ec.(83) y parcialmente degenerada [Ec.(84)].

Tomemos como ejemplo particular en tiempo inicial $t = 0$. Para este tiempo la matriz de densidad reducida para el sistema atómico está dada por

$$\hat{\rho}_A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (85)$$

Esta matriz de densidad tiene valores propios degenerados

$$\{0, 0, 1\}. \quad (86)$$

Si tratáramos de usar el método presentado en la Sec. 3 necesitaríamos de los vectores propios asociados a estos valores. Es fácil encontrar un par de vectores propios:

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{u}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (87)$$

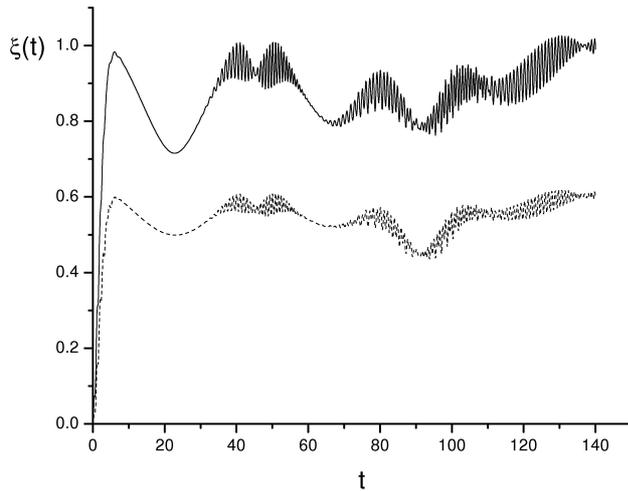


FIGURA 3. Entropía ($\langle \hat{S} \rangle$, línea continua) y pureza ($\xi(t)$, línea punteada) para un sistema de tres niveles en interacción con un campo coherente.

Para encontrar el tercer vector tenemos que construir la matriz auxiliar \mathbb{M} :

$$\mathbb{M} = \mathbb{I}\lambda - \hat{\rho}_A = -\hat{\rho}_A, \quad (88)$$

la cual no tiene inversa y, por lo tanto, no nos puede ayudar a encontrar el tercer vector, \vec{u}_2 , asociado al valor propio degenerado $r_2 = 0$ como se muestra en la Sec. 2. En este caso tenemos la suerte de poder encontrar fácilmente este tercer vector asociado como $\vec{u}_2 = (0, 1, 0)$, pero en general, para dimensión mayor, hallar los vectores sería tedioso. Es decir, la matriz de transformación de coordenadas no es más que la matriz identidad de tres por tres, $\mathbb{U} = \mathbb{I}$, pues la matriz de densidad reducida, $\hat{\rho}_A$, ya tiene una forma diagonal. Por lo tanto el logaritmo de la matriz reducida está dado por

$$\ln(\hat{\rho}_A) = \begin{pmatrix} \ln(0) & 0 & 0 \\ 0 & \ln(0) & 0 \\ 0 & 0 & \ln(1) \end{pmatrix}. \quad (89)$$

Si seguimos el método basado en el teorema de Cayley-Hamilton —presentado en la Sec. 4— los valores propios de la matriz de densidad reducida del sistema atómico [Ec.(86)] remiten a un vector de coeficientes y matriz de Vandermonde definidos como la Ec.(84):

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{f}(r) = \begin{pmatrix} \ln(0) \\ \frac{1}{0} \\ \ln(1) \end{pmatrix}. \quad (90)$$

Ahora la última ecuación tenemos un problema muy importante: las funciones $\ln(0)$ y $1/0$ son singulares, por lo tanto trabajaremos con los límites por la derecha de ambas funciones de tal forma que para nosotros

$$\begin{aligned} \ln(0) &\rightarrow \lim_{x \rightarrow 0^+} \ln(x), \\ \frac{1}{0} &\rightarrow \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{1}{x}. \end{aligned}$$

Trabajando con las representaciones simbólicas podemos escribir la función logaritmo de la matriz reducida $\hat{\rho}_A$ [Ec.(80)] como

$$\begin{aligned} \ln(\hat{\rho}_A) &= y_0 \mathbb{I} + y_1 \hat{\rho}_A + y_2 \hat{\rho}_A^2, \\ &= \begin{pmatrix} \lim_{x \rightarrow 0^+} \ln(x) & 0 & 0 \\ 0 & \lim_{x \rightarrow 0^+} \ln(x) & 0 \\ 0 & 0 & \ln(1) \end{pmatrix}, \\ &= \begin{pmatrix} \ln(0) & 0 & 0 \\ 0 & \ln(0) & 0 \\ 0 & 0 & \ln(1) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (91)$$

Este resultado es igual al encontrado anteriormente [Ec.(89)]. Por lo tanto el valor medio de la entropía del estado inicial [Ec.(12)] es

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}(0) \rangle &= \text{Tr}[-\hat{\rho}_A(0) \ln(\hat{\rho}(0))], \\ &= \text{Tr} - \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ln(0) & 0 & 0 \\ 0 & \ln(0) & 0 \\ 0 & 0 & \ln(1) \end{pmatrix}, \\ &= 0. \end{aligned} \quad (92)$$

Esto concuerda con el valor esperado del valor medio de la entropía para la matriz de densidad del estado inicial $\hat{\rho}_A$, pues el estado inicial es un estado puro y debe poseer una entropía media igual a cero —un ejercicio para el interesado es derivar el valor máximo de la entropía media, **pista**: el valor máximo se da cuando el estado del sistema de tres niveles es un estado mezclado y es igual a $\langle \hat{S}_{max} \rangle = \ln(3) = 1.09861$.

El procedimiento antes demostrado para el tiempo inicial, $t = 0$, puede repetirse para cada instante t que deseemos analizar. Con cada uno de los valores medios de la entropía encontrados para cada instante de tiempo podemos construir una gráfica. Para darle un poco más de relevancia al análisis de la entropía podemos estudiar al mismo tiempo la pureza del sistema [5] dada por la ecuación

$$\xi(t) = 1 - \text{Tr}(\hat{\rho}_A^2(t)), \quad (93)$$

la cual, para sistemas con dimensión mayor a dos, es una aproximación a la entropía y debe ser calculada según cada caso particular.

Si tomamos los resultados para la evolución temporal de la entropía y la pureza del estado inicial del sistema de tres niveles [Ec.(70)] en interacción con el campo cuantizado y los graficamos contra un eje temporal (Fig. 3) podemos darnos cuenta de que cualitativamente el comportamiento de ambas funciones es similar. Pero, si prestamos mayor atención, la entropía nos indica que el sistema alcanza su mayor pureza en las primeras etapas de evolución —el primer valle es mucho más profundo que el segundo— mientras que la pureza nos muestra que el sistema alcanzará su mayor pureza mucho más tarde —el segundo valle de la función de pureza es mucho más profundo que el primero. De esta forma se revela la inexactitud de la función de pureza, Ec.(93), para dimensión mayor que dos. Esto es un resultado de interés que nos

revela la importancia de trabajar con métodos analíticos para calcular funciones de matrices para obtener resultados que las funciones aproximadas no nos permiten observar.

6. Conclusiones

Hemos presentado un par de métodos analíticos para calcular funciones matriciales. El primero de los métodos se basa en encontrar las funciones de matrices en forma generalizada de Jordan. El segundo está basado en el teorema de Cayley-Hamilton y en las matrices de Vandermonde, este método requiere del conocimiento de los valores propios de la matriz argumento solamente y de realizar una serie de multiplicaciones matriciales para ser aplicado. Si contamos con una matriz argumento cuadrada de dimensión N , \mathbb{A} , podemos resumirlo en los siguientes pasos:

1. Encontrar los valores propios de la matriz argumento \mathbb{A} .
2. Formar la matriz de Vandermonde, \mathbb{V} , correspondiente y encontrar la inversa de su transpuesta.

3. Calcular los coeficientes auxiliares, $\{c_k\}$, $\vec{c} = \mathbb{V}^T{}^{-1} \vec{f}(\lambda)$.

4. Encontrar la función matricial, $f(\mathbb{A}) = \sum_{n=0}^{N-1} c_n \mathbb{A}^n$.

Este método es muy simple de aplicar, como se mostró en la Sec. 4, y nos entrega la función de una matriz. Otro punto a favor es su simplicidad, lo que permite llevarlo fácilmente a un sistema de álgebra computarizada.

Finalmente, se presentó una aplicación muy simple en el análisis de la pureza del estado de un sistema. Es mucho más sencillo analizar directamente el operador de entropía, $\hat{S}_{\hat{\rho}_A} = -\ln(\hat{\rho}_A)$, que encontrar la pureza del sistema, la cual se tiene que analizar y derivar según el caso que se esté tratando —en el caso presentado no hubo necesidad de derivar tal expresión pues era ya conocida. Además, si bien la pureza nos presenta información general confiable, para obtener datos más precisos debemos buscar la información proporcionada por la entropía, un ejemplo de esto es el caso presentado de un sistema de tres niveles en interacción con un campo cuantizado donde la función de pureza da un dato errado sobre el momento en que el sistema llega a su estado más puro.

-
- | | |
|--|--|
| <ol style="list-style-type: none"> 1. K. Ogata, <i>Modern control engineering</i>, 3rd Ed. (Prentice Hall, 1997); W. Brogan, <i>Modern Control Theory</i>, 3rd Ed. (Prentice Hall, 1991). 2. H. Goldstein, <i>Classical mechanics</i>, 3rd Ed. (Prentice Hall, 2002); W. Greiner, <i>Classical mechanics</i> (Springer Verlag, 2002). 3. F. Silva Leite y P. Crouch, <i>Journal Math. Phys.</i> 40 (2002) 3561. 4. K.B. Wolf, <i>Rev. Mex. Fis.</i> 49 (2003) 465. 5. A. Bohm, <i>Quantum mechanics</i>, 3rd Ed. (Springer, 1993); M.A. Nielsen y I.L. Chuang, <i>Quantum Computation and Quantum Information</i>, 1st Ed. (Cambridge Univ. Press, 2000). | <ol style="list-style-type: none"> 6. M.O. Scully y M.S. Zubairy, <i>Quantum optics</i> (Cambridge university press, 1997). 7. A.I. Mal'cev, <i>Foundations of linear algebra</i>, 2da. Ed. (W.H. Freeman and company, 1963). 8. M. Vidyasagar, <i>IEEE Trans. Aut. Control (Correspondence)</i> AC-15 (1970) 600; Y.L. Kuo and M.L. Liou, <i>IEEE Trans. Aut. Control (Correspondence)</i> AC-16 (1971) 521. 9. J.T. Tou, <i>IEEE Trans. Aut. Control (Correspondence)</i> AC-9 (1964) 314; S.H. Wu, <i>IEEE Trans. Aut. Control (Correspondence)</i> AC-11 (1966) 769. |
|--|--|