

MITSCHRIEB ZUR VORLESUNG: SPEZIELLE MATRIZEN IN DER PHYSIK

Dr. Lang

Vorlesung Wintersemester 2006/2007

Letzte Aktualisierung und Verbesserung: 3. Februar 2007

Mitschrieb der Vorlesung SPEZIELLE MATRIZEN IN DER PHYSIK
von Herrn Dr. LANG im Wintersemester 2006/2007
von MARCO SCHRECK.

Dieser Mitschrieb erhebt keinen Anspruch auf Vollständigkeit und Korrektheit.
Kommentare, Fehler und Vorschläge und konstruktive Kritik bitte an Marco.Schreck@gmx.de.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Stochastische Matrizen	9
2.1	Modell von Kerner	9
2.2	Grundlagen der stochastischen Matrizen	9
2.3	Glasübergang und Kerner-Modell	10
2.3.1	H.Gibbs-Di-Maszio-Gesetz	11
3	Allgemeine Eigenschaften von Markow-Ketten	17
3.1	Zustandsklassifikation	17
3.1.1	Wiederkehrende (rekurrente) und vorübergehende (transiente) Zustände	17
3.2	Definition der Periode eines Zustands	19
3.3	Eindimensionale endliche Irrfahrten (random walks)	19
3.4	Detailliertes Gleichgewicht, Reversibilität	20
3.4.1	Reversibilität	20
3.5	Ergodensatz für Markow-Ketten	21
4	Zirkulante Matrizen (zirkuläre Matrizen)	23
4.1	Allgemeine Eigenschaften	23
4.1.1	Definition	23
4.1.2	Eigenschaften	23

Kapitel 1

Einleitung

1.) Stochastische Matrizen (Markow-Ketten diskreter Zeit)

Dabei handelt es sich um Matrizen der Form $\text{Mat}_N([0, 1] \subset \mathbb{R})$. Jede Spalte dieser Matrizen entspricht einer Wahrscheinlichkeitsverteilung. Es gilt $\sum_{i=1}^N M_{ij} = 1 \forall j \in \{1, \dots, N\}$. Bei stationären (homogenen) Markow-Ketten mit diskreter Zeitvariablen $n \in \mathbb{Z}_{\geq}$ treten sie auf als Übergangsmatrizen von Takt n zu Takt $n + 1$. Wir betrachten Zustände endlicher Zahl N : $I_N = \{1, 2, \dots, N\}$. $j \in I$ sei ein bestimmter Zustand. Zur Zeit n sei die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P^{(n)} = (P_1^{(n)}, \dots, P_N^{(n)})$ gegeben mit $P_j^{(n)} = \mathcal{P}(X_n = j)$, wobei X eine Zufallsgröße ist.

Es gibt einen Wahrscheinlichkeitsraum $(\Omega, \mathcal{A}, \mathcal{P})$. \mathcal{P} sei normiert über $\mathcal{P}(\Omega) = 1$. \mathcal{A} ist eine σ -Algebra. Die Übergangsmatrix leistet nun Übergänge von n nach $n + 1$:

$$P^{(n+1)} = MP^{(n)}, P_i^{(n+1)} = \sum_{j=1}^N M_{ij} P_j^{(n)}$$

$M^{(n)}$ ist in unseren Fällen zeitunabhängig (stationär). Eine Markow-Kette (mit diskreten Zustandsraum, diskreter Zeitvariable und stationärer Übergangsmatrix) besitzt die sogenannte Markow-Eigenschaft. Es ist $X_n = j$ und $X_{n+1} = i \in I_N$, egal, was X_0, X_1, \dots, X_{n-1} war (geschichtslos). Dann gilt $P^{(n)} = M^n P^{(0)}$, wobei $P^{(0)}$ die Wahrscheinlichkeitsverteilung am Anfang war ($M^0 = \mathbf{1}_N$).

$$M_{ij} = \mathcal{P}(X_{n+1} = i | X_0 = i_0, X_1 = i_1, \dots, X_{n-1} = i_{n-1}, X_n = j)$$

Mittels dieser Markow-Ketten lässt sich beispielsweise der Glasübergang (R.Kerner, 1991) erklären.

$$T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \kappa C}$$

Schaut man sich den Fall eines $\text{Se}_{1-c}X_c$ -Glases an, so gilt:

$$T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \beta_x(\langle r \rangle_{(c)} - 2)} \text{ mit } \langle r \rangle = 2 + (m_x - 2)c$$

Experimentell wurde β_x (mit $x = \text{Ge}$) ein Wert von 0,65 bis 0,74 gemessen. Theoretisch gilt $\langle r \rangle_{(c)} = 2 + (4 - 2)c$ und $\beta_{\text{Ge}} = 1/(2 \ln(2)) \approx 0,72$ (nach Kerner). Eine andere Anwendung wären sogenannte Random Walks (Irrfahrten).

2.) Zirkulante Matrizen $\in \text{Mat}_N(\mathbb{C})$

Dabei handelt es sich um Matrizen der Form $C_N = C_N(\{a_i\}_1^N)$ mit $(C_N)_{ij} = a_{i-j} \pmod{N}$. Es gilt $a_0 = a_N$ usw. und schließlich $a_{r+N} = a_r$ mit $r \in \mathbb{Z}$ (Translationsinvarianz).

$$C_N = \begin{pmatrix} a_N & a_{N-1} & a_{N-2} & \dots & a_1 \\ a_1 & a_N & a_{N-1} & \dots & a_2 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1} & a_{N-2} & \dots & a_1 & a_N \end{pmatrix}$$

Für die Determinante gilt:

$$\det(C_N) = \prod_{k=1}^N \lambda_k^{(N)} = \prod_{k=1}^N \left(\sum_{j=1}^N a_j \varrho_N^{jk} \right) \text{ mit } \varrho_N = \exp\left(i \frac{2\pi}{N}\right)$$

ϱ_N sind die N -ten Einheitswurzeln aus der zyklischen Gruppe Z_N . a_j lässt sich als Fourierreihe schreiben:

$$a_j = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \lambda_k \exp\left(-i \frac{2\pi}{N} k j\right)$$

$\lambda_k^{(n)}$ sind die Fourierkoeffizienten.

$$\lambda = F a, (F_N)_{ij} = \varrho_N^{ij}, \widehat{F} = \frac{1}{\sqrt{N}} F$$

\widehat{F} ist unitär, es gilt also $\widehat{F}^\dagger \widehat{F} = \widehat{F} \widehat{F}^\dagger = \mathbf{1}_N$. $F_N^4 = \mathbf{1}_N$ (Eigenwerte: $\pm 1, \pm i$).

$$C_N = \sum_{j=1}^N a_j U_N^j \text{ mit } (U_N)_{ij} = \delta_{1, i-j} = P \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & N-1 & N \\ N & 1 & 2 & \dots & N-1 \end{pmatrix}$$

$(U_N)_{ij}$ ist auch eine Zirkulante (zyklische Matrix).

$$V_N = U_{N, \text{diag}}, (V_N)_{ij} = \delta_{ij} \varrho_N^i$$

$\{U_N^m V_N^n\}$ ist eine Basis für $\text{Mat}_N(\mathbb{C})$. Die Basisentwicklung für komplexe Matrizen ist dann gegeben durch:

$$M = \sum_{m_1, m_2} M_{\vec{m}} U_N^{m_1} V_N^{m_2}$$

$$c = a * b, c_j = \sum_{k=1}^N a_k b_{k-j}, C_1 C_2 = C_3(c)$$

Hierbei bedeutet das Symbol „*“ die Faltung der Folge von a mit der Folge von b . Die U-V-Basis findet in der Quantenmechanik ihre Anwendung.

$$(p; m_1, m_2) := (\varrho_N^{\frac{1}{2}})^p (\varrho_N^{\frac{1}{2}})^{m_1 m_2} U_N^{m_1} V_N^{m_2} \text{ mit } (\varrho_N^{\frac{1}{2}})^p = \exp\left(i \frac{\pi}{N} p\right)$$

Matrixprodukt:

$$(p; \vec{m})(q; \vec{n}) = (p + q - \vec{m} \times \vec{n}, \vec{m} + \vec{n}) = (p + q - (m_1 n_2 - m_2 n_1), \vec{m} + \vec{n})$$

Kontinuierliche Heisenberggruppe H_1 :

$$g(t; z) = \exp(i(t\mathbf{1} + \bar{z}a + a^\dagger z))$$

Die Heisenbergalgebra ist gegeben durch:

$$[q, p] = i\mathbf{1} \text{ mit } a = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip), a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(q - ip), [a, a^\dagger] = \mathbf{1}$$

Als Übung kann folgendes gezeigt werden:

$$g(t, z)g(s, w) = g\left(t + s - \frac{i}{2}(z\bar{w} - \bar{z}w)z + w\right)$$

3.) E.T.-Bell-Matrizen (Polynome, Partitionspolynome (1927))

$$S_{\vec{m}}^{(N)} = (\varrho_N^{\frac{1}{2}})^{m_1 m_2} U_N^{m_1} V_N^{n_1}$$

$$S_{\vec{m}}^{(N)} S_{\vec{n}}^{(N)} = \exp(-i\alpha_2(\vec{m}, \vec{n})) S_{\vec{n}}^{(N)} S_{\vec{m}}^{(N)} \text{ mit } \alpha_2 = \frac{\pi}{N}(\vec{m} \times \vec{n})$$

Dabei handelt es sich um die projektive Darstellung der Torusgruppe $Z_N \times Z_N$ (nach Kerner-DuBois-Molette-Madore, 1900). Im Kontinuumslimes $N \mapsto \infty$ kommt man zu den quantenmechanischen Variablen p und q .

C.) Bell-Matrizen (Polynome)

Wir gehen aus von den Potenzreihen

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_n}{n!} x^n \text{ mit } f_0 = 0 \text{ und } g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g_n}{n!} x^n$$

Gesucht ist

$$F(x) = (f \circ g)(x) = f(g(x)) = \sum_{n=1}^{\infty} F_n[f; g] \frac{x^n}{n!} \text{ mit } F_n[f, g] = \sum_{k=1}^n B_{nk}[g_1, \dots, g_{n-k+1}] f_k$$

$$B^{(N)}[g] = \begin{pmatrix} g_1 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ g_2 & g_1^2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ g_N & \dots & \dots & \dots & \dots & g_1^N \end{pmatrix}$$

Als Übung kann die n -te Ableitung von $f(g)(x)$ berechnet werden. Spezialfälle: Stirling 1. und 2. Art

- a.) Eigenwerte von Funktionen, Rekursionen (Riordan)
- b.) Unterteilung orthogonaler Polynome
- c.) $\det(A)$, Invarianten aus Spur-A-Produkten

Eine Anwendung in der Physik ist das Studium realer Gase.

Kapitel 2

Stochastische Matrizen

2.1 Modell von Kerner

Mit diesem Modell wird der Glasübergang beschrieben. Das Gibbs-Di-Mazio-Gesetz arbeitet mit einer diskreten Version von Markow-Ketten, was gleichbedeutend zu stochastischen Matrizen ist.

2.2 Grundlagen der stochastischen Matrizen

Definition:

Eine stochastische Matrix M ist $\in \text{Mat}_{\mathbb{N}}(\mathbb{R}_{\geq})$ („ $M \geq 0$ “). Diese Notation bedeutet, dass alle Elemente der Matrix ≥ 0 sind. Die Spaltensumme muss gleich 1 sein:

$$\sum_{i=1}^N M_{ij} = 1 \quad \forall j = 1, \dots, N$$

Diese Matrizen treten auf als Übergangsmatrizen von j nach i in stationären Markow-Ketten (M ist n - („Zeit“)unabhängig mit $n \in \mathbb{Z}_{\geq}$).

$$p^{(n+1)} = Mp^{(n)} \quad \text{mit } p^{(n)} = (p_1^{(n)}, \dots, p_N^{(n)})^T$$

$p_i^{(n)}$ ist die Wahrscheinlichkeit, dass zur Zeit n einer der möglichen N Zustände des Systems, den mit Nummer i , annimmt. Es ist $i \in I_N = \{1, \dots, N\}$. Ist $P^{(0)}$ normiert, so ist auch $p^{(1)} = Mp^{(0)}$ normiert.

$$p^{(n)} = M^n p^{(0)} \quad \text{mit } M^0 = \mathbf{1}_N$$

$$\sum_{i=1}^N M_{ij}^n = \sum_{i=1}^N M_{ik} (M^{n-1})_{kj} = \sum_i M_{ik}^{n-1} = \dots = \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^N M_{il} M_{lj} = \sum_i M_{ij} = 1$$

Im allgemeinen Falle bezeichnet man diese Bedingungen als K-Chapman-Bedingungen. Markow-Ketten (I_N , M , $p^{(0)}$) sind geschichtslos; das heißt, es interessiert nur der aktuelle Zustand. Was zuvor passiert ist, ist ohne Bedeutung. p ist ein Gleichgewichtszustand, wenn die Bedingung $p = Mp$ (von n unabhängig) gilt, wenn also p sich selbst reproduziert. Von einer asymptotischen Verteilung wird gesprochen, falls der Grenzwert $n \mapsto \infty$ gebildet wird.

$$p^{(\infty)} = M^\infty p^{(0)} \quad \text{mit } M^\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} M^n$$

Definition:

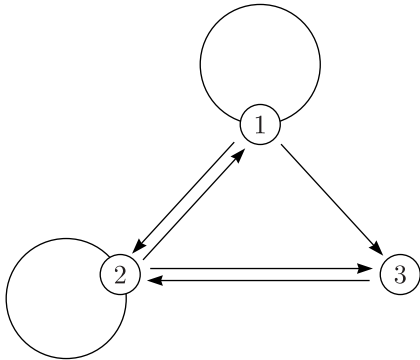
M ist irreduzibel, wenn es zu je zwei verschiedenen i, j eine gerichtete Pfadverbindung gibt mit positiven Elementen > 0 .

$$\forall i, j \neq i : \exists_{(i_1, \dots, i_k)} M_{ii_1} M_{i_1 i_2} \dots M_{i_k j} > 0$$

Sonst ist M reduzibel. M_N ordnet man einen Digraphen (beim dem die Linien gerichtet („directed“) sind) zu. Diesen Graphen bezeichnen wir mit G_{M_N} . Die Vertizes wollen wir mit $1, \dots, N$ numerieren und eine Linie (Kante) von i nach j wird mit M_{ji} bezeichnet.

Beispiel:

$$M_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ 0 & \frac{1}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$



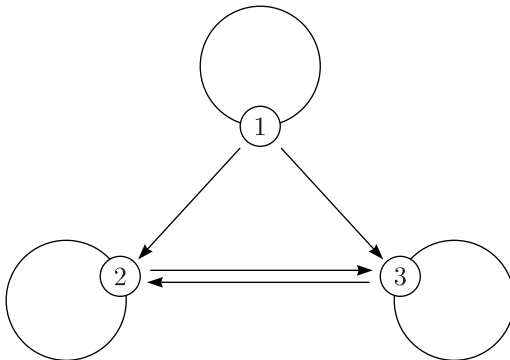
Man kann nun den Begriff der Irreduzibilität über solche Graphen definieren:

Definition:

Je zwei verschiedene Vertices sind mit gleichsinnig durchlaufenem Pfad zu verbinden (stark zusammenhängender Digraph).

Beispiel:

$$M'_3 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{2}{3} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$



Da sich die Vertices nicht gleichsinnig miteinander verbinden lassen, ist die Matrix irreduzibel. Dies entspricht der zuvorigen Definition von Irreduzibilität. Reduzibel via Permutation $i_1 i_2 \dots i_k, j_1 \dots j_k$ mit $M_{i_\alpha, j_\beta} = 0$.

$$M = \begin{pmatrix} A & C \\ 0 & B \end{pmatrix}$$

2.3 Glasübergang und Kerner-Modell

Gläser besitzen keine Kristallstruktur. Es existiert keine langreichweitige Ordnung, sondern nur eine sogenannte Nahordnung. Gläser sind also keine normalen Festkörper, besitzen aber einen gewissen Zusammenhalt/Bindung. Gläser werden nicht beim Schmelzpunkt T_m fest, sondern beim sogenannten Glaspunkt $T_g < T_m$. Man spricht deshalb von unterkühlten Flüssigkeiten.

Silizium Si besitzt einen Schmelzpunkt T_m von 1420°C . T_m lässt sich durch Hinzusetzen einen Modifizierers (beispielsweise NaCO_3) erniedrigen. Glasübergänge sind keine Phasenübergänge erster Art. Ein binäres Glas besteht aus zwei Komponenten wie beispielsweise Selen und Arsen (als Modifizierer). Binäre Gläser können mit dem Kerner-Modell beschrieben werden. T_g ist abhängig von c . Beispielsweise kann T_g mit wachsendem c ansteigen oder auch abfallen. Bei $\langle r \rangle \approx 2, 4$ (Koordinationszahl) springt das Glas unter bestimmten Frequenzen. $\langle r \rangle$ folgt aus den Wertigkeiten m_i . Beispielsweise gilt $m_{\text{Se}} = 2, m_{\text{As}} = 3$ und $m_{\text{Ge}} = 4$.

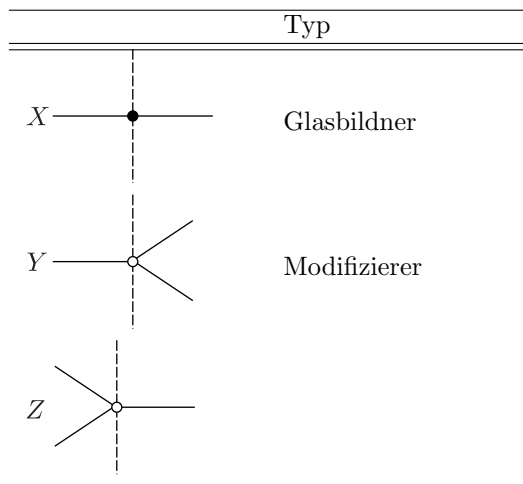
2.3.1 H.Gibbs-Di-Maszio-Gesetz

$$T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \beta_M(\langle r \rangle - 2)} \text{ mit } \langle r \rangle = 2 + (m_M - 2)c$$

Die -2 im Nenner gilt für Se. Die Messung bei $\text{Se}_{1-c}\text{Ge}_c$ wurde 1997 durchgeführt [FENG ET AL PRL 78 (1997) 4422]. Es gilt beispielsweise $T_g(\text{Se}) \approx 43^\circ \text{C}$. Mit c nimmt in diesem Fall auch T_g zu.

Man macht nun folgende Annahmen:

- i.) Beim Abkühlen entstehen aus der Schmelze Keimzentren, die durch Agglomeration größer werden (Cluster). Am Rande der Cluster geschieht das Wachstum.
- ii.) Stochastik: p ist die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Bindungen am Rand
- iii.) Jeder Entwicklungsschritt ($n \mapsto n + 1$) wird durch eine Übergangsmatrix M beschrieben. P^∞ sei die asymptotische Verteilung.
- iv.) Se_{1-c} - As_c -Einheiten: zweiwertiges Se ($m_1 = 2$) und dreiwertiges As ($m_2 = 3$)
- v.) Am Rand jedes Clusters gibt es drei Typen.




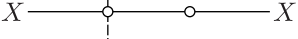
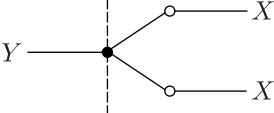
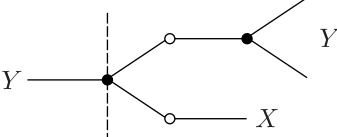
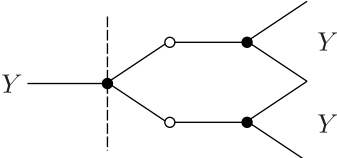
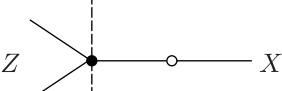
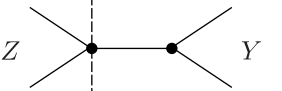
Es gilt $I_3 = \{x, y, z\}$. An jede freie Bindung wird eine der zwei Einheiten angelagert. Wir wollen jedoch keine Schleifen betrachten.

- vi.) Ein neuer Rand entsteht nach Absättigung der freien Bindungen.

Boltzmannfaktoren, wobei $-E_{11}$, $-E_{12}$ und $-E_{22}$ die effektiven Bindungsenergien sind:

$$\exp\left(\frac{E_{11}}{k_B T}\right) = \exp(-\varepsilon), \exp\left(\frac{E_{12}}{k_B T}\right) = \exp(-\eta) \text{ und } \exp\left(\frac{E_{22}}{k_B T}\right) = \exp(-\alpha)$$

Wichtig ist außerdem die Multiplizität M_3 und die Konzentration c .

	Multiplizität	Konzentration	Boltzmannfaktor	
	2	$1 - c$	$\exp(-\varepsilon)$	X
	3	c	$\exp(-\eta)$	Y
	$2 \cdot 2$	$(1 - c)^2$	$\exp(-2\eta)$	$X + X = 2X$
	$2 \cdot 2 \cdot 3$	$c(1 - c)$	$\exp(-\eta - \alpha)$	$X + Y$
	$3 \cdot 3$	c^2	$\exp(-2\alpha)$	$Y + Y = 2Y$
	2	$1 - c$	$\exp(-\eta)$	X
	3	c	$\exp(-\alpha)$	Y

Konstruieren wir nun die erste Spalte von M_3 :

$$\begin{pmatrix} x \mapsto x \\ x \mapsto y \\ x \mapsto z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2(1-c)\exp(-\varepsilon) \\ 3c\exp(-\eta) \\ 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 2(1-c) \\ 3c\exp(\varepsilon - \eta) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Die zweite Spalte ist gegeben durch:

$$\begin{pmatrix} y \mapsto x \\ y \mapsto y \\ y \mapsto z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8(1-c)^2\exp(-2\eta) + 12c(1-c)\exp(-\eta - \alpha) \\ 12c(1-c)\exp(-\eta - \alpha) + 18c^2\exp(-2\alpha) \\ 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 4(1-c)\xi[(1-c)\xi + 3c\mu] \\ 6c\mu[2(1-c)\xi + 3c\mu] \\ 0 \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} 2(1-c)\xi \\ 3c\mu \\ 0 \end{pmatrix}$$

Es tauchen immer die relativen Größen $\xi = \exp(\varepsilon - \eta)$ und $\mu = \exp(\varepsilon - \alpha)$ auf. Kommen wir nun zur dritten Spalte:

$$\begin{pmatrix} z \mapsto x \\ z \mapsto y \\ z \mapsto z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2(1-c)\exp(\varepsilon - \eta) \\ 3c\exp(\varepsilon - \alpha) \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2(1-c)\xi \\ 3c\mu \\ 0 \end{pmatrix}$$

Damit ergibt sich die stochastische Matrix M_3 :

$$M_3 = \begin{pmatrix} \frac{2(1-c)}{2(1-c)+3c\xi} & \frac{2(1-c)\xi}{2(1-c)\xi+3c\mu} & \frac{2(1-c)\xi}{2(1-c)\xi+3c\mu} \\ \frac{3c\xi}{2(1-c)+3c\xi} & \frac{3c\mu}{2(1-c)\xi+3c\mu} & \frac{3c\mu}{2(1-c)\xi+3c\mu} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Spezialfall: zweite und dritte Spalte gleich, genau einmal den Eigenwert 1 und $|\lambda| = 1$ Eigenwerte keine

Hierbei ist z unwesentlich, man studiert eigentlich nur noch M_2 . Als nächstes wollen wir $p^{(n)} = M^n p^{(0)}$ bestimmen und außerdem M^∞ . Eine weitere Annahme wird später sein, dass $p^\infty \stackrel{!}{=} (1 - c, c)^\top$ ist.

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 - A & B \\ A & 1 - B \end{pmatrix} \text{ mit } A = \frac{3c\xi}{2(1-c) + 3x\xi}, B = \frac{2(1-c)\xi}{2(1-c)\xi + 3c\mu}$$

Es soll nun M_2^n für $n \mapsto \infty$ berechnet werden. Dabei gibt es folgende Vorgehensweisen:

- 1.) Eigenwerte und Eigenfunktionen, Diagonalmatrix
- 2.) Spektralzerlegung (Sylvester-Formel), Eigenwerte $Z_\lambda[M]$

$$F(M) = \sum_{\lambda} F(\lambda) Z_\lambda[M]$$

- 3.) Cayley-Hamilton-Theorem:

Aus der charakteristischen Gleichung $\varphi(\lambda) = 0$ mit $\varphi(\lambda) = (\lambda - \lambda_+)(\lambda - \lambda_-)$ folgen die Eigenwerte. Das Cayley-Hamilton-Theorem besagt, dass dies auch für die Matrix M gilt:

$$\varphi(M) = (M - \lambda_+ \mathbf{1})(M - \lambda_- \mathbf{1}) = \mathbf{0}$$

Das Theorem gilt allgemein für beliebige $n \times n$ -Matrizen. Den Beweis findet man beispielsweise in [COURANT, HILBERT] oder [ZURMÜHL]. Zum Beweis wird benötigt:

$$\varphi(\lambda) = \det(M - \lambda \mathbf{1}) = (-1)^N (\lambda^N - \sigma_1 \lambda^{N-1} + \dots)$$

Die σ_n sind elementarsymmetrische Funktionen. Sei $\varphi(\lambda) \neq 0$:

$$(M - \lambda \mathbf{1})^{-1} = \frac{1}{\varphi(\lambda)} \text{Adj}^\top(M - \lambda \mathbf{1})$$

Im Falle $N = 3$ gilt $\text{Adj}^\top(M - \lambda \mathbf{1}) = \lambda^2 A_1 + \lambda^1 A_2 + \lambda^0 A_3$.

$$\mathbf{1}_3 = (M - \lambda \mathbf{1})(M - \lambda \mathbf{1})^{-1} \Rightarrow (-1)^3 (\lambda^3 - \sigma_1 \lambda^2 + \sigma_2 \lambda^1 - \sigma_3 \lambda^0) \mathbf{1}_3 = (\dots)(\dots)$$

Man bestimmt λ^0, \dots , multipliziert diese mit M^0, \dots und erhält $\varphi(M) = 0$.

$$(M - \lambda_+ \mathbf{1})(M - \lambda_- \mathbf{1}) = \mathbf{0}$$

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2} \left(\text{Sp}(M) \pm \sqrt{(\text{Sp}(M))^2 - 4 \det(M)} \right) = \begin{cases} 1 \\ 1 - (A + B) \end{cases}$$

Was ist nun M^n ?

$$M_2^n = U_{n-1}(x, y)M - yU_{n-2}(x, y)\mathbf{1} \text{ mit } U_n = 2xU_{n-1} - yU_{n-2}, U_0 = 1, U_{-1} = 0$$

Die U_n sind eine Verallgemeinerung der Tschebyschew-Polynome ($y = 1$).

$$x = \frac{1}{2} \text{Sp}(M) = 1 - \frac{A+B}{2}, y = \det(M) = 1 - (A+B)$$

$$U_n = \frac{1}{\lambda_+ - \lambda_-} (\lambda_+^{n+1} - \lambda_-^{n+1})$$

Für $\lambda_+ = \lambda_-$ gilt $M^n = nx^{n-1}M - (n-1)x^n\mathbf{1}$. Wegen $A+B=0$ ist dieser Fall jedoch hier uninteressant. Die erzeugende Funktion der U_n ist gegeben durch:

$$\sum_{n=0}^{\infty} U_n(x, y)t^n = \frac{1}{1 - 2xt + yt^2}$$

Für $n \mapsto \infty$ ist $\lambda_+ = 1$ und $|\lambda_-| < 1$. Hieraus folgt $1 - (A+B) > -1$ ($A+B < 2$) oder $1 - (A+B) < 1$ ($A+B > 0$).

$$M^\infty = \lim_{n \rightarrow \infty} M^n = \frac{1}{1 - \lambda_-} (M - y\mathbf{1}) = \frac{1}{1 - \lambda_-} (M - y\mathbf{1}) = \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} B & B \\ A & A \end{pmatrix}$$

Aus $M^\infty v^\infty = v^\infty$ folgt:

$$v^\infty = \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \text{ da } \lambda_- \mapsto 0$$

v^∞ ist die Gleichgewichtsverteilung. Schauen wir uns die erste und zweite Spalte von M an:

$$\begin{pmatrix} 1-A \\ A \end{pmatrix} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix} \xleftarrow{n \rightarrow \infty} \begin{pmatrix} B \\ 1-B \end{pmatrix}$$

v^∞ ist auch die asymptotische Verteilung. Man bezeichnet deshalb $v^\infty \equiv p^\infty$ auch als asymptotische Gleichgewichtsverteilung. Der Endzustand sollte sich in folgender Form schreiben lassen, was zu einer zusätzlichen Bedingung führt:

$$p^\infty \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 1-c \\ c \end{pmatrix}$$

Hieraus folgt die Funktion $c(T)$ und durch Inversion $T_g(c)$. Aus obiger Bedingung folgt $B/A = (1-c)/c$.

$$2(1-c)\xi[2(1-c) + 3c\xi] = \left(\frac{1}{c} - 1\right) [2(1-c)\xi + 3c\mu] 3c\xi$$

$c = 0$ und $c = 1$ sind triviale Lösungen. Die nichttriviale Lösung lautet:

$$c = \frac{2(2-3\xi)}{4+9\mu-12\xi} = c(T) = \frac{1-\frac{3}{2}\xi}{1+\frac{9}{4}\mu-3\xi}$$

Man kann nun noch $0 < c < 1$ prüfen. Wir interessieren uns nun für die Steigung der Kurve für $c \mapsto 0$. $dT/dc|_{c \rightarrow 0}$ folgt aus $dc/dT|_{\xi \rightarrow 2/3}$. Mit

$$\xi' = \frac{d\xi}{dT} = -\frac{1}{T}\xi \ln(\xi) \text{ wobei } \xi = \exp\left(-\frac{E_{11}-E_{12}}{k_B T}\right), \mu = \exp\left(-\frac{E_{11}-E_{22}}{k_B T}\right)$$

und $\mu = 0$ (entspricht dem Fall ohne As-As) folgt:

$$\left. \frac{dc}{dT} \right|_{\xi=\frac{2}{3}} = \frac{1}{T} \ln\left(\frac{2}{3}\right) (-1) = \frac{1}{T} \ln\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{T} \ln\left(\frac{m_2}{m_1}\right)$$

Die Steigungsgleichung lautet schließlich:

$$\left. \frac{dT}{dc} \right|_{c \rightarrow 0} = \frac{T_g(0)}{\ln\left(\frac{3}{2}\right)}$$

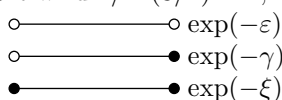
T_g steigt mit wachsender Konzentration c . Die Taylorentwicklung um $c = 0$ hat folgende Form:

$$T_g(c) = T_g(0) + \frac{T_g(0)}{\ln\left(\frac{3}{2}\right)} c + \dots = \frac{T_g(0)}{1 - \frac{c}{\ln\left(\frac{3}{2}\right)}} \text{ mit } 0 < c < 0,1$$

Dabei handelt es sich um die Gibbs-Di-Mazio-Formel. Mittels der Koordinationszahl $\langle r \rangle := m_1(1-c) + m_2c = 2(1-c) + 3c = 2+c$ folgt:

$$T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \frac{\langle r \rangle - 2}{\ln\left(\frac{3}{2}\right)}}$$

Oft wird $1/\ln(3/2) \approx 2,47$ als β bezeichnet. Wir betrachten nun ein $\text{Se}_{1-c}\text{Ge}_c$ -Glas ($m_1 = 2, m_2 = 4$).



Sei $\varrho = \exp(\varepsilon - \gamma)$ und $\omega = \exp(\varepsilon - \xi)$. Wir betrachten nur M_2 und nicht M_4 , da es reicht, mit den ersten beiden Zuständen zu arbeiten:

$$M_2 = \begin{pmatrix} \frac{1-c}{1-c+2c\varrho} & \frac{(1-c)\varrho}{(1-c)\varrho+2\omega c} \\ \frac{2c\varrho}{1-c+2c\varrho} & \frac{2\omega c}{1-c+2c\varrho} \end{pmatrix}$$

Gemeinsamer Faktor der ersten Spalte ist $(1-c)^2 \varrho^2 + 4(1-c)c\varrho\omega + 4c^2\omega^2$. p^∞ ist asymptotische Gleichgewichtszustand mit der Bedingung $p^\infty = (1-c, c)$. Man erhält außer den trivialen Lösungen $c = 0, 1$:

$$c = \frac{1-2\varrho}{1-4\varrho+4\omega}$$

$$\left. \frac{dT_g}{dc} \right|_{c \rightarrow 0} = \frac{T_g(0)}{\ln\left(\frac{4}{2}\right)}$$

Mittels einer Taylorentwicklung um $c = 0$ folgt:

$$T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \beta(\langle r \rangle - 2)} \text{ mit } \beta_{\text{Se-Ge}} = \frac{1}{2\ln(2)} \approx 0,72$$

Experimentell wurde $\beta = 0,72$ bestimmt!

Wir wollen nun ein allgemeines binäres Glas $G_{1-c}M_c$ mit $m_G = m_1$ und $m_M = m_2$ betrachten. Die mittlere Koordinationszahl ist gegeben durch $\langle r \rangle_i = m_1(1-c) + m_2c$. Sei $\varrho = \exp(\xi - \gamma)$ und $\omega = \exp(\varepsilon - \xi)$.

$$M_{(m_1, m_2)} = \begin{pmatrix} \frac{m_1(1-c)}{m_1(1-c)+m_2c\varrho} & \frac{m_1(1-c)\varrho}{m_1(1-c)\varrho+m_2c\omega} \\ \frac{m_2c\varrho}{m_1(1-c)+m_2c\varrho} & \frac{m_2c\omega}{m_1(1-c)\varrho+m_2c\omega} \end{pmatrix}$$

Die erste Spalte besitzt einen gemeinsamen Faktor

$$\sum_{k=0}^{m_1-2} \binom{m_1-2}{k} (m_1(1-c))^{m_1-(k+2)} (m_2c)^k \varrho^k$$

ebenso wie die zweite Spalte:

$$\sum_{k=0}^{m_2-2} \binom{m_2-2}{k} (m_1(1-c))^{m_2-(k+2)} (m_2c)^k \varrho^{m_2-(k+2)} \omega^k$$

Die entsprechenden Ergebnisse sind dann von folgender Form:

$$p^\infty = \frac{1}{A+B} \binom{B}{A} \stackrel{!}{=} \binom{1-c}{c}$$

Es gibt wieder die trivialen Lösungen $c = 0, 1$. Die nichttriviale Lösung ist:

$$c = \frac{m_1(m_1 - m_2\varrho)}{m_1^2 + m_2\omega - 2m_1m_2\varrho}$$

$$\beta = \frac{1}{(m_2 - m_1) \ln\left(\frac{m_2}{m_1}\right)}, T_g(c) = \frac{T_g(0)}{1 - \beta(\langle r \rangle - m_1)}$$

Kapitel 3

Allgemeine Eigenschaften von Markow-Ketten

3.1 Zustandsklassifikation

3.1.1 Wiederkehrende (rekurrente) und vorübergehende (transiente) Zustände

Die Wahrscheinlichkeit, in k Schritten von i nach j zu kommen, soll mit $f_{ij}^{(k)}$ bezeichnet werden. Soll das ganze in einem Schritt funktionieren, ist $f_{ij}^{(1)} = M_{ij}$. Weiterhin gilt:

$$f_{ij}^{(k+1)} = \sum_{l \neq i} f_{il}^{(k)} M_{lj}$$

Die Wahrscheinlichkeit, zum selben Zustand j wiederzukehren, ist gegeben durch $f_j^{(k)} \equiv f_{jj}^{(k)}$.

$$F_j = \sum_{k=1}^{\infty} f_j^{(k)}$$

Anhand von diesen Größen kann man definieren, wann ein Zustand sicher wiederkehrend ist.

Definition:

j ist sicher wiederkehrend (rekurrent), falls $F_j = 1$ ist bzw. vorübergehend (transient) wiederkehrend für $F_j < 1$.

Satz:

Mit

$$M_j := \sum_{k=1}^{\infty} M_{jj}^k$$

gilt:

$$F_j = \frac{M_j}{1 + M_j} = \frac{1}{1 + \frac{1}{M_j}}$$

Für $F_j = 1$ gilt $M_j = \infty$.

Beweis:

Wir müssen über alle Wahrscheinlichkeiten summieren, von j nach j zu kommen:

$$(M^k)_{jj} = f_j^{(1)} M_j j^{k-1} + f_{jj}^{(2)} M_{jj}^{k-2} + \dots + f_j^{(k-1)} M_{jj} + f_j^{(k)} \mathbf{1}_{jj} \quad (*)$$

Wir benutzen die Erzeugendenfunktionen

$$M_j(z) = \sum_{k=1}^{\infty} (M^k)_{jj} z^k, F_j(z) = \sum_{k=1}^{\infty} f_j^{(k)} z^k \text{ mit } |z| < 1$$

Wir multiplizieren (*) mit z^k und summieren über k :

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} (M^k)_{jj} z^k &= z f_j^{(1)}(1) + z^2 [f_j^{(1)} M_{jj}^1 + f_j^{(2)} M_{jj}^0] + \dots = \\ &= z f_j^{(1)} (1 + z M_{jj}^1 + z^2 M_{jj}^2 + \dots) + z^2 f_j^{(2)} (1 + \dots) + \dots = \\ &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} z^k f_j^{(k)} \right) (1 + M_j(z)) = \end{aligned}$$

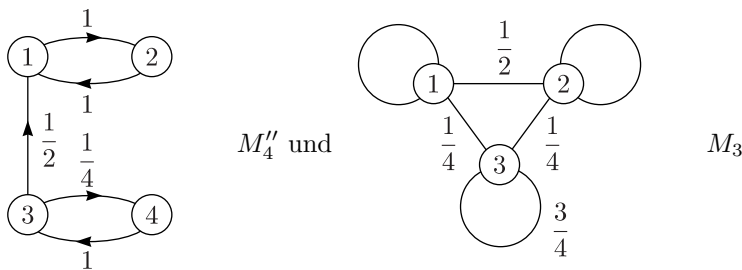
Hieraus ergibt sich

$$F_j(z) = \frac{M_j(z)}{1 + M_j(z)}$$

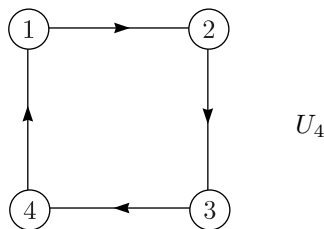
und für $z \mapsto 1$ folgt die Beziehung aus dem Satz. □

Es gilt auch: j ist transient genau dann, wenn $M_{jj}^n = 0$ für unendlich viele n ($M_j < \infty$). j ist rekurrent genau dann, wenn $M_{jj}^n = 1$ für unendlich viele n ($M_j = \infty$).

Beispiel:



3 und 4 sind transient (unwesentlich), 1 und 2 sind rekurrent (M_4'').
 2 und 3 sind transient (unwesentlich) und 1 (sicher) rekurrent (M_3).



Dies ist eine rekurrente **Kette**.

Ein weiterer Begriff ist die erwartete Rückkehrzeit bei rekurrenten Zuständen (Ergodentheorem!). Wir definieren also den Erwartungswert der Zeit:

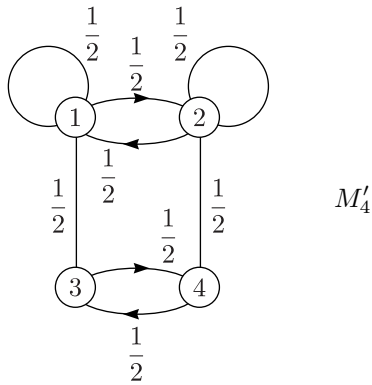
$$a_j = \sum_{n=1}^{\infty} n f_j^{(n)} = z \frac{d}{dz} F_j(z) \Big|_{z=1}$$

n ist die „Zeit“.

Definition:

j heißt **0-rekurrent**, falls $a_j = \infty$ ist. $a_j < \infty$ bezeichnet man als **positiv rekurrent**.

Beispiel:



1 und 2 sind rekurrent, denn

$$a_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{2^n} = 2 < \infty$$

Satz:

Für irreduzible Ketten gilt $a_j = 1/p_j^a$. Den Beweis findet man im Buch von NORRIS.

3.2 Definition der Periode eines Zustands

Für den Zustand j definieren wir die Menge $d_j = \text{ggT}\{k \in \mathbb{N}_0 \mid M_{jj}^k > 0\}$. Man bezeichnet d_j als Periode. Falls $d_j = 1$ heißt, wird der Zustand als aperiodisch bezeichnet.

Beispielsweise gilt für M'_4 : $d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = 2$.

3.3 Eindimensionale endliche Irrfahrten (random walks)

Die Wahrscheinlichkeit für einen Sprung nach rechts bzw nach links sei jeweils $1/2$.

1.) Absorbierend:

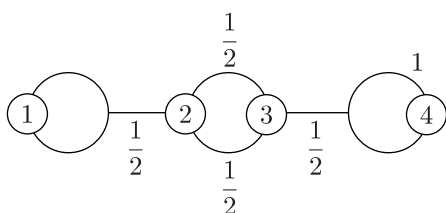
- a.) links: falls $k = 1$, bleibe mit Wahrscheinlichkeit 1 da
- b.) rechts: falls $k = N$, bleibe mit Wahrscheinlichkeit N da

2.) Reflektierend:

- a.) links: falls $k = 1$, springe mit Wahrscheinlichkeit 1 nach 2
- b.) rechts: falls $k = N$, springe mit Wahrscheinlichkeit 1 nach $N - 1$

Beispiel:

$$M_4^{AA} = \begin{pmatrix} 1 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 1 \end{pmatrix}$$



Der Graph ist reduzibel und besitzt keine Standardform.

$$P \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 2 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & 0 & 1/2 \\ & & 1/2 & 0 \end{pmatrix}$$

Es gilt $PMP^{-1} = M'_4$.

3.4 Detailliertes Gleichgewicht, Reversibilität

Der Gleichgewichtszustand ist definiert über $Mp = p$.

$$\sum_{j=1}^N (M_{ij}p_j - M_{ji}p_i) \equiv 0$$

Man bezeichnet das Gleichgewicht als detailliert, falls $M_{ij}p_j = M_{ji}p_i$ für alle i, j (keine Summe über i bzw. j !) Die Zahl der Bedingungen ist:

$$\frac{N(N-1)}{2} + N = \frac{N(N+1)}{2}$$

Die obige Gleichung liefert a priori eine Gleichgewichtsverteilung $p^{(0)} = p$. Als Übung kann man mittels vollständiger Induktion zeigen:

$$(M^n)_{ij}p_j = \dots = (M^n)_{ji}p_i \text{ und } p_i^{(n+1)} = p_i^{(n)} \text{ (von } n \text{ unabhängig)}$$

$$\bar{f}_{p^{(n)}} = \sum_{j=1}^N f_j p_j^{(n)}$$

Dies gilt von n unabhängig.

Bemerkung:

Ist $p > 0$ und befindet sich (M, p) im determinierten Gleichgewicht, so besitzt M nur reelle Eigenwerte λ .

$$\widehat{M}_{ij} := \frac{1}{\sqrt{p_i}} M_{ij} \sqrt{p_j}, \widehat{M}\hat{v} = \lambda\hat{v}, \widehat{M} \stackrel{!}{=} \widehat{M}^\top$$

3.4.1 Reversibilität

Zeitumkehrkette: \widehat{M}_N zu M_N

$$\widehat{M}_{ij}p_j = M_{ji}p_i \text{ für alle } i, j$$

Falls $p_i = p$ gilt für alle i ist $\widehat{M} = M^\top$.

- 1.) \widehat{M} ist stochastisch.
- 2.) (\widehat{M}, p) ist im Gleichgewicht, falls (M, p) im Gleichgewicht ist ($\widehat{M}p = p, Mp = p$).
- 3.) Aus der Irreduzibilität von M folgt, dass auch \widehat{M} irreduzibel ist.

$$M_{ji_n} \dots M_{i_2 i_1} M_{i_1 i} p_i = \widehat{M}_{i i_1} \widehat{M}_{i_1 i_2} \dots M_{i_n j} p_j > 0$$

Ist $M = \widehat{M}$, so ist die Kette reversibel.

Beispiel:

- i.) $M'_4: p = 1/2(1, 1, 0, 0)$ (im determinierten Gleichgewicht, reversibel)
- ii.) $U_4: \lambda = 1, v_1 = 1/4(1, 1, 1, 1)$ (**nicht** im determinierten Gleichgewicht, Widerspruch zu 1.4)
- iii.) Isingmodell, $\widehat{M}_2 = W_2$ (im determinierten Gleichgewicht)
- iv.) $M_3:$

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 2/3 & 1/3 \\ 1/3 & 0 & 2/3 \\ 2/3 & 1/3 & 0 \end{pmatrix}$$

Der zum Eigenwert $\lambda = 1$ zugehörige Eigenvektor ist $1/3(1, 1, 1)$. Es gilt $\widehat{M} = M^T \neq M$.

3.5 Ergodensatz für Markow-Ketten

$$\bar{f} = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{f}_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{f}_{p(k)}$$

seien Langzeitmittelwerte von $f: I \mapsto \mathbb{R}$.

$$\bar{f}_p = \sum_{i=1}^N f_i p_i \stackrel{?}{=} f_{p(\infty)}$$

$p^{(\infty)}$ ist der **eine** Gleichgewichtszustand. Wir könnten dies im irreduziblen, primitiven Fall testen. Eine zusätzliche Bedingung ist, dass die Kette nicht positiv rekurrent ist ($a_j < \infty \forall j$, erwartete Wahrscheinlichkeiten endlich). Beispiel: irreduzible Kette automatisch, da nach dem Satz gilt $a_j = 1/p_j^{(a_j)} < \infty$

Beispiel:

Wir betrachten ein binäres Glas $Se_{1-c}As_c$. Sei f die Koordinationszahl ($m_1 = 2, m_2 = 3$).

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1-A & B \\ A & 1-B \end{pmatrix}$$

$$M^k = 1^k Z_{\lambda_1=1}[M] + \lambda_2^k Z_{\lambda_2=1-(A+B)}[M] \text{ mit } Z_{\lambda_1=1} = \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} B & B \\ A & A \end{pmatrix}, Z_{\lambda_2} = \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} A & -B \\ -A & B \end{pmatrix}$$

$$\bar{f}_{p(k)} = m^T M^k v^{(0)} \text{ mit } v^{(0)} = \begin{pmatrix} 1-c \\ c \end{pmatrix}$$

$$\bar{f}_{v^{(k)}} = m^T M^k v^{(0)} = \bar{f}_{M^k v^{(0)}} \stackrel{\text{linear}}{=} \bar{f}_{Z_1[M]v^{(0)}} + (1-(A+B))^k \bar{f}_{Z_2[M]v^{(0)}} = \bar{f}_{v^\infty} + 2.\text{Term}$$

$$f_n := \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{f}_{v^{(k)}} = \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} \bar{f}_{v^\infty} + (1-(A+B))^k \bar{f}_{Z_2[M]v^{(0)}} = \bar{f}_{v^\infty} + f_{Z_2[M]v^{(0)}} \frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} (1-(A+B))^k$$

$$\bar{f} = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{f}_n = \bar{f}_{v^{(\infty)}} \stackrel{?}{=} \bar{f}_{p^{(\infty)}}$$

$$p^{(\infty)} = \frac{1}{A+B} \begin{pmatrix} B \\ A \end{pmatrix}$$

Nichtfluktuationsbedingung: $p^{(0)} = v^{(0)}$

Kapitel 4

Zirkulante Matrizen (zirkuläre Matrizen)

Manchmal werden die Determinanten dieser Matrizen (und nicht unbedingt die Matrizen selbst) als Zirkulanten bezeichnet.

4.1 Allgemeine Eigenschaften

4.1.1 Definition

Dabei handelt es sich um komplexe $N \times N$ -Matrizen ($C_N \in \text{Mat}_{ij}(\mathbb{C})$)

$$C_N = C_N(\{a_j\}_0^{N-1}) \text{ mit } (C_N)_{ij} = a_{i-j \bmod N} \text{ mit } i, j \in \{0, \dots, N-1\}$$

Die a_N sind translationsinvariant; es gilt also $a_{N+r} = a_r$ für alle $r \in \mathbb{Z}$.

$$C_N = \begin{pmatrix} a_0 & a_{N-1} & a_{N-2} & \dots & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_{N-1} & \dots & a_3 & a_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{N-1} & a_{N-2} & a_{N-3} & \dots & a_1 & a_0 \end{pmatrix}$$

$$R(a_0, a_{N-1}, \dots, a_1) = (a_1, a_0, a_{N-1}, \dots, a_2)$$

$$C_N = C_N(a_0, a_{N-1}, \dots, a_1)$$

4.1.2 Eigenschaften

- a.) Translationsinvarianz: $C_{ij} = C_{i+r, j+r}$ für $r \in \mathbb{Z}$ ($c_{00} =: a_0$, charakteristische Eigenschaft)

Falls dies für eine Matrix C_N gilt, handelt es sich um eine Zirkulante. Die zirkulanten Matrizen sind ein Spezialfall der Toeplitz-Matrizen $(T_N)_{ij} = a_{i-j}$ mit $i, j \in \{0, 1, \dots, N-1\}$ (nicht mod N).

- b.) Die Spaltensummen S_N sind immer gleich:

$$S_N = \sum_{i=0}^{N-1} a_i$$

- c.) Invarianten:

i.) Spur: $\text{Sp}(C_N) = Na_0$

- ii.) Determinante:

$$\det(C_N) = \prod_{k=0}^{N-1} \lambda_k^{(N)}$$

Die Eigenwerte λ_k sind die Fouriertransformierten der Einträge; es gilt also:

$$\lambda_k^{(N)} = \sum_{j=0}^{N-1} \varrho_N^{jk} a_j \text{ mit } \varrho_N = \exp\left(i\frac{2\pi}{N}\right)$$

Dies soll nun bewiesen werden. Dazu betrachten wir:

$$\Pi_N = \text{diag}[\varrho_N^0 = 1, \varrho_N^1, \dots, \varrho_N^{N-1}]$$

ϱ ist irgendeine N -te Einheitswurzel. $C'_N = \Pi_N C_N \Pi_N^{-1}$ ist Zirkulante, da $\varrho^i (C_N)_{ij} \varrho^{-j} = a_{i,-j} \varrho^{i-j}$. Die erste Zeile lautet $\{a_i \varrho^i\}_{i=0}^{N-1}$. Addiere zur ersten Zeile die Summe der restlichen $N-1$ Zeilen. Die neue erste Zeile besitzt nach (b) N gleiche Elemente:

$$\sum_{i=0}^{N-1} a_i \varrho^i$$

$$\det(C_N) = \det(C'_N) = \left(\sum_i^{N-1} a_i \varrho^i \right) \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Für jedes $\varrho = \varrho_N^k$ gilt:

$$\det(C'_N) = \det(C_N) = \prod_{k=0}^{N-1} \left(\sum_{i=0}^{N-1} a_j (\varrho_N^k)^j \right) \quad \square$$

d.) Eigenvektoren von C_N zu $\{\lambda_k^{(N)}\}_0^{N-1}$

$$C_N u_k^{(N)} = \lambda_k^{(N)} u_k^{(N)} \text{ mit } k = 0, \dots, N-1$$

Aufgrund der Struktur der zirkulanten Matrizen, sind die Eigenvektoren sind von a_{ij} abhängig.

$$(u_k^{(N)})_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-kj}$$

Dies beweisen wir durch:

$$\sum_j^{N-1} (c_N)_{ij} u_{k,j}^{(N)} = \sum_j^{N-1} a_{i-j} \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-kj} \stackrel{i-j=j'}{=} \sum_{j'} a_{j'} \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-(i-j')k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-ik} \sum_{j'} a_{j'} \varrho_N^{j'k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-ik} \lambda_k$$

Die Eigenvektoren bilden ein vollständiges Orthonormalsystem:

$$\langle u_k^{(N)}, u_l^{(N)} \rangle = \sum_{j=0}^{N-1} u_{k,j}^* u_{l,j} = \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \varrho_N^{(k-l)j} = \delta_{k,l} = \delta_{k-l,0}$$

Dies folgt über die Kreisteilergleichung (geometrische Reihe!):

$$\boxed{\sum_{j=0}^{N-1} \varrho_N^{(k-l)j} = N \delta_{kl}}$$

Analog ergibt sich die Vollständigkeit:

$$\sum_{k=0}^{N-1} (u_j^{(N)*})_i (u_k^{(N)})_j = \delta_{i,j}$$

e.) Fourier-Transformation (diskrete) Z_N

Fouriertransformation von $\{a_j\}_{j \in \mathbb{Z} \bmod N}$: $a_{j+N} = a_j$

$$a : \begin{cases} Z_N \mapsto \mathbb{C} \\ j \mapsto a_j \end{cases}$$

$$[a(x), a(x+T) = a(x)]$$

$$\lambda_k^{(N)} = \sum_{j=0}^{N-1} \varrho_N^{jk} a_j$$

Fouriertransformation der $\{a_i\}_0^{N-1}$, $\lambda = \widehat{F}a$, $\widehat{F} = \widehat{F}_N$: $(\widehat{F}_N)_{ij} = \varrho_N^{ij}$ ($\widehat{F}_N^\dagger = \widehat{F}_N$)

$$F_N = \frac{1}{\sqrt{N}} \widehat{F} \text{ wobei } (F_N)_{ij} = \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{ij}$$

Hierbei gilt $\widehat{F}_N^\dagger \widehat{F}_N = N \mathbf{1}_N$ bzw. $F_N^\dagger F_N = \mathbf{1}_N = F_N F_N^\dagger$. Außerdem ist $\lambda = (\sqrt{N} F) a$. Für den Fall $N = 4$ gilt:

$$F_4^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} = P_{(13)}$$

Man stellt fest, dass $F_4^4 = \mathbf{1}_4$ ist. Allgemein gilt:

$$F_N^2 = P \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & \dots & N-1 \\ 0 & N_1 & N-2 & \dots & 1 \end{pmatrix} = P_{((1,N-1)(2,N-2)\dots)} \begin{cases} (\frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} + 1) & \text{für } N \text{ gerade} \\ (\frac{N-1}{2}, \frac{N+1}{2}) & \text{für } N \text{ ungerade} \end{cases}$$

Auch allgemein ist $F_N^4 = \mathbf{1}_N$. F_N ist unitär und besitzt Eigenwerte, die der Gleichung $\lambda^4 = 1$ genügen, also $\{+1, -1, +i, -i\}$. Die Umkehrung der Transformation ist gegeben durch:

$$a = \frac{1}{\sqrt{N}} F_N^* \lambda = \frac{1}{N} (\sqrt{N} F_N^{-1}) \lambda \text{ wobei } F_N^* = F_N^\dagger = F_N^{-1}$$

Darüber hinaus besitzt die Parsevalsche Gleichung ihre Gültigkeit:

$$a^\dagger a = \frac{1}{N} \lambda^\dagger F_N F_N^{-1} \lambda = \frac{1}{N} \lambda^\dagger \lambda$$

Beispielsweise gilt:

$$F_4 = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} \varrho^0 & \varrho^0 & \varrho^0 & \varrho^0 \\ \varrho^0 & \varrho^1 & \varrho^2 & \varrho^3 \\ \varrho^0 & \varrho^2 & \varrho^4 & \varrho^6 \\ \varrho^0 & \varrho^3 & \varrho^6 & \varrho^8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & \varrho_4^1 & \varrho_4^2 & \varrho_4^3 \\ 1 & & & \\ 1 & & & \end{pmatrix} \text{ mit } \varrho_4 = \exp\left(\frac{2\pi i}{4}\right)$$

Die 3×3 -Untermatrix (ohne die Einsen) ist vom Typ einer Vandermondeschen Matrix:

$$(V_N)_{ij} = x_j^i : \begin{pmatrix} x_0^0 & x_1^0 & \dots & x_{N-1}^0 \\ x_0^1 & x_1^1 & \dots & x_{N-1}^1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0^{N-1} & x_1^{N-1} & \dots & x_{N-1}^{N-1} \end{pmatrix} = V_N(x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$$

$$F_N = V_N[\varrho^0 = 1, \varrho_N^1, \dots, \varrho_N^{N-1}]$$

Die Determinante einer solchen Vandermondeschen Matrix ist von folgender Gestalt (Rekursionsformel):

$$\det(V_N) = (x_{N-1} - x_{N-2}) \cdot (x_{N-1} - x_{N-3}) \cdot \dots \cdot (x_{N-1} - x_0) \det(V_{N-1}) \Rightarrow \det(V_N) = \prod_{N-1 \geq j \geq i \geq 0} (x_j - x_i)$$

Zum Beweis der Rekursionsformel schauen wir uns den Fall $N = 3$ an:

$$\det(V_3) = \det \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_0 & x_1 & x_2 \\ x_0^2 & x_1^2 & x_2^2 \end{pmatrix} = (-1)^{3-1} (x_0 - x_2) \cdot (x_1 - x_2)$$

f.) Diagonalisiere C_N :

C_N ist normal, hat also die Eigenschaft $C_N C_N^\dagger = C_N^\dagger C_N$. Nach einem mathematischen Satz lässt sich jede normale Matrix unitär diagonalisieren. Als Übung kann man

$$\sum_j a_{i-j} a_{k-j}^* \stackrel{!}{=} \sum_j a_{j-i}^* a_{j-k}$$

zeigen und zwar durch Umbenennen der Indizes.

$$\widehat{U}^\dagger M \widehat{U} = D, \widehat{U}^\dagger \widehat{U} = \mathbf{1} = \widehat{U} \widehat{U}^\dagger \text{ mit } M^\dagger M = M M^\dagger$$

\widehat{U} hat in Spalten die orthonormierten Eigenvektoren von M . Hier gilt $C_N \widehat{U}_N = \widehat{U}_N D_N$.

$$\sum_j a_{i-j} \varrho_N^{-jk} = \sum_{j'} a_j \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-(i-j')k} = \frac{1}{\sqrt{N}} \varrho_N^{-ik} \sum_{j'} a_{j'} \varrho_N^{j'k}$$

$$\boxed{\widehat{U}_N = F_N^{-1} = F_N^\dagger = F_N^*}$$

i.) Die Spektralzerlegung der C_N ist $Z_k[M]$, falls $M = \widehat{U} D \widehat{U}^\dagger$.

$$(Z_k[C_N])_{ij} = (P_k^{(N)})_{ij} = \frac{1}{N} \varrho_N^{-k(i-j)} \text{ mit } k = 0, \dots, N-1$$

Als Übung kann man die Projektionseigenschaften von $P_k^{(N)}$ zeigen. Jedes $P_k^{(N)}$ ist außerdem eine Zirkulante mit den Eigenwerten $(\lambda_k)_l = \delta_{kl}$.

ii.) Jede Diagonalmatrix ist unitär äquivalent zu einer Zirkulante.

g.) Faltungen (Konvolutionen):

$\{a_j\}_0^{N-1}$ mit $\{b_j\}_0^{N-1}$ gefaltet, führt auf:

$$(a \otimes b)_j = \sum_{k=0}^{N-1} a_k b_{j-k} = \sum_{k=0}^{N-1} b_k a_{j-k} = (b \otimes a)_i$$

$$\lambda = \sqrt{N} F a, \mu = \sqrt{N} F b, \nu = \lambda \mu \quad (\nu_i = \lambda_i \mu_i)$$

Hieraus ergibt sich $\nu = \sqrt{N} F c$ mit $c = a \otimes b$, was als Übung gezeigt werden kann. Die Faltung ist assoziativ:

$$(a \otimes b) \otimes c = a \otimes (b \otimes c)$$

Beispiel:

Wir betrachten

$$C_3[a_0, a_2, a_1] = \begin{pmatrix} a_0 & a_2 & a_1 \\ a_1 & a_0 & a_2 \\ a_2 & a_1 & a_0 \end{pmatrix}$$

$$\det(C_3) = a_0^3 + a_1^3 + a_2^3 - 3a_0 a_1 a_2 = (a_0 + a_1 + a_2)(a_0 + a_1 \varrho_3^1 + a_2 \varrho_3^2)(a_0 + a_1 \varrho_3^2 + a_2 \varrho_3^4)$$