Autovalori e autovettori

$$Ax = \lambda x \qquad x \neq 0$$

Allora λ è un autovalore della matrice A corrispondente all'autovettore x

- Risolviamo l'equazione secolare

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

- Trasformazioni di similarità

$$\begin{aligned}
&\det(SAS^{-1} - \lambda I) = \\
&\det(SAS^{-1} - \lambda SS^{-1}) = \\
&\det(S(A - \lambda I)S^{-1}) = \\
&\det(S)\det(A - \lambda I)\det(S^{-1}) = \\
&\det(A - \lambda I)
\end{aligned}$$

Una trasformazione di similarità non altera gli autovalori

Autovettori

Parto da

$$SAS^{-1} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n) = \Lambda$$

per ricavare gli autovettori; moltiplico a sinistra per S^{-1} e ottengo

$$AS^{-1} = \Lambda S^{-1}$$

Chiamo $u^{(i)}$ il vettore che ha per componenti gli elementi della colonna i di S^{-1} e ottengo

$$A_{ik} S^{-1}_{kj} = \lambda_j S^{-1}_{kj}$$

$$A_{ik} u^{(j)}_k = \lambda_j u^{(j)}_k$$

I vettori colonna di $S^{(-1)}$

Il metodo preferito per trovare autovalori e autovettori sono le trasformazioni di similarità. Usare l'equazione secolare per trovare n radici complesse è un sistema lento e poco efficace, salvo che per casi particolari.

Metodi Specifici

Per risolvere il problema si effettuano trasformazioni consecutive $T_1, T_2, ...T_n$

$$\Lambda = T_n \cdot T_{n-1} ... T_1 \cdot A \cdot T_1^{-1} ... T_{n-1}^{-1} T_n^{-1}$$

Da cui si ricava che

$$S = T_n \cdot T_{n-1} \cdot ... \cdot T_1$$

e S^{-1} è la matrice che contiene gli autovettori

Matrici simmetriche

Ci sono sempre n autovalori reali o complessi, magari coincidenti, per una matrice di ordine n. Le matrici simmetriche ($a_{ij} = a_{ji}$) e quelle hermitiane ($a_{ij} = a_{ji}^*$) hanno la proprietà di avere solo autovalori reali. La matrice S che le diagonalizza è una matrice unitaria.

Rotazioni di Jacobi

Una trasformazione unitaria conserva la quantità

$$\sum_{ij=1}^{n} a_{ij}^2$$

L'idea di Jacobi è di effettuare tante piccole rotazioni ognuna delle quali aumenta gli
elementi diagonali. In questo modo gli
elementi non diagonali diminuiscono e, dopo un certo numero di iterazioni divengono nulli. La matrice elementare T_{ij} con $i < j$ è simile alla matrice unità con solo

$$T_{ii} = T_{jj} = \cos(\theta) \quad T_{ij} = \sin(\theta) \quad T_{ji} = -\sin(\theta)$$

L'angolo θ è scelto in modo da annullare a_{ij}. Ad esempio T_{13} con $n = 3$ è

$$\begin{pmatrix} \cos(\theta) & 0 & \sin(\theta) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\theta) & 0 & \cos(\theta) \end{pmatrix}$$

Dettagli tecnici

- solo le righe i e j sono cambiate da ogni rotazione;
- se a_{ij} è già molto piccolo la rotazione non viene effettuata;
- si fanno più cicli ciascuno con tutti i possibili i e j;
- l'elemento a_{ij} è cambiato in

$$a'_{ij} = (\cos^2(\theta) - \sin^2(\theta))a_{ij} + \sin(\theta)\cos(\theta)(a_{ii} - a_{jj})$$

- il valore di θ per cui $a'_{ij} = 0$ riduce gli elementi non diagonali

$$\sum_{p,q=1,p\neq q}^{n} (a'_{pq})^2 = \sum_{p,q=1,p\neq q}^{n} (a_{pq})^2 - 2a_{ij}$$

Matrici tridiagonali

Sono diverse da zero solo per a_{ij} con $|i-j| \leq 1$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix}$$

È particolarmente facile calcolare il determinante per una matrice tridiagonale simmetrica

$$D_4(\lambda) = \begin{vmatrix} a_{11}-\lambda & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{12} & a_{22}-\lambda & a_{23} & 0 \\ 0 & a_{23} & a_{33}-\lambda & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{34} & a_{44}-\lambda \end{vmatrix}$$

Da cui

$$D_4(\lambda) = (a_{44}-\lambda)D_3(\lambda) - a_{34}^2 D_2(\lambda)$$

Gli zeri di $D_N(\lambda)$ possono poi essre trovati con il metodo di Newton o con altri metodi per la ricerca delle radici

Metodo di Householder

- Vale per matrici simmetriche

- Le riduce alla forma tridiagonale

- usa il metodo delle successive trasformazioni di similarità

$$P_{N-2} \cdot P_{N_3} \ldots P_2 \cdot P_1$$

- Scelgo P della forma

$$P_{ij} = \delta_{ij} - 2u_i u_j$$

  con $\|u\| = 1$

- $P^2 = I$ Infatti

$$P_{ik}P_{kj} = (\delta_{ik} - 2u_i u_k)(\delta_{kj} - 2u_k u_j)$$

$$= \delta_{ij} - 2u_i u_j - 2u_i u_j + 4u_i u_j \|u\|^2 = \delta_{ij}$$

- Ne segue che $P = P^{-1}$ e la trasformazione di similarità per una matrice A è

$$PAP^{-1} = PAP$$

• La trasformazione conserva la simmetria di A

$$(PAP)_{ij} = (\delta_{ik} - 2u_i u_k) a_{kl} (\delta_{lj} - 2u_l u_j) =$$

$$a_{ij} - 2u_i(u_k a_{kj}) - 2u_j(a_{il}u_l) + 4u_i u_j (u_k a_{kl} u_l) =$$

$$a_{ji} - 2(a_{jk}u_k)u_i - 2(u_l a_{li})u_j + 4u_i u_j (u_k a_{lk} u_l) = (PAP)_{ji}$$

• Posso ora cercare un valore del vettore $\mathbf{u}$ che renda la matrice più vicina a una tridiagonale, annullando tutti gli elementi a_{j1} con $j > 2$, e quindi anche a_{1j} con $j > 2$ In particolare se $u_1 = 0$ ho che

$$a'_{11} = (\delta_{1k} - 2u_1 u_k) a_{kl} (\delta_{l1} - 2u_l u_1) = a_{11}$$

$$a'_{1j} = (\delta_{1k} - 2u_1 u_k) a_{kl} (\delta_{lj} - 2u_l u_j) = a_{1j} - 2a_{1l} u_l u_j$$

Definisco per comodità di calcolo

$$T = \sum_{k=1}^{N} a_k u_k$$

e trovo

$$a'_{1j} = a_{1j} - 2T u_j$$

facendo il quadrato e sommando su j

$$\sum_{j=1}^{N} a'^2_{1j} = \sum_{j=1}^{N} a^2_{1j} + 4T^2 \sum_{j=1}^{N} u_j^2 - 2T \sum_{j=1}^{N} a_{1j} u_j = \sum_{j=1}^{N} a^2_{1j}$$

Impongo ora che la prima colonna della matrice A' sia analoga a quella di una matrice tridiagonale. Ho allora

$$a'_{1j} = 0 \text{ se } j > 2 \Rightarrow a_{1j} = 2T u_j$$

e trovo facilmente

$$a'_{11} = a_{11} \quad {a'}^2_{12} = \sum_{j=2}^{N} a^2_{1j}$$

Partendo ora dalle due equazioni

$$\begin{aligned} a_{12} &= a'_{12} + 2Tu_2 \\ a_{1j} &= 2Tu_j \end{aligned}$$

Moltiplicando per a_{1j} e sommando su j

$$\sum_{j=2}^{N} a^2_{1j} = 2T^2 + a'_{12}a_{12}$$

e infine

$$\begin{aligned} T &= \sqrt{(\sum_{j=2}^{N} a^2_{1j} - 2a_{12}a'_{12})/2} \\ u_2 &= (a_{12} - a'_{12})/2T \\ u_j &= a_{1j}/2T \end{aligned}$$

- Si può ora proseguire calcolando in modo analogo le trasformazioni che annullano gli elementi non tridiagonali della seconda, terza, etc. colonna.

- Ogni volta dovrò predere trasformazioni in cui $u_1 = 0$, $u_1 = u_2 = 0$, $u_1 = u_2 = u_3 = 0$, e così via fino alla colonna $N-2$ compresa.

- A questo punto la matrice è tridiagonale e si applicano le regole per trovare gli autovalori delle matrici tridiagonali.

In sostanza

- Considero gli elementi a_{ij} della colonna che voglio ridurre a forma tridiagonale

- Trovo u_j dalle formule precedenti

- Calcolo $y_i = \sum_j a_{ij} u_j$ e z=$\sum_{ij} u_i u_j a_{ij}$ che mi servono per calcolare tutti gli a'_{ij} dalla formula

$$a'_{ij} = a_{ij} - 2u_i y_j - 2u_j y_i + 4z u_i u_j$$

- Ripeto il procedimento per $N-2$ volte.

Limiti sugli autovalori

Si dimostra che per ogni autovalore λ vale

$$\min_i \left(a_{ii} - \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right) \leq \lambda \leq \max_i \left(a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}| \right)$$

Inoltre, per matrici tridiagonali simmetriche, si dimostra che la sequenza dei determinanti parziali

$$1, D_1(\lambda), D_2(\lambda), \ldots, D_N(\lambda)$$

cambia segno tante volte quanti sono gli autovalori minori di λ

- La prima equazione mi permette di restringere la ricerca delle radici dell'equazione secolare;

- la seconda equazione mi consente di verificare se ho trovato tutte le radici.

Oscillatore armonico quantistico

Considero l'equazione di Schrödinger per gli autovalori

$$\hat{H}\psi = E\psi$$

e prendo un s.o.n.c. di funzioni $u_j(x)$. ψ si potrà esprimere come combinazione lineare di queste

$$\psi(x) = \sum_{j=1}^{N} c_j u_j(x)$$

Moltiplicando a destra per $u_i(x)$ e integrando trovo

$$\textstyle\sum_{j=1}^{N} \quad c_j \displaystyle\int u_i(x)\hat{H}u_j(x)\,dx = E\sum_{j=1}^{N} c_j\delta_{ij} = Ec_i$$

$$\textstyle\sum_{j=1}^{N} \quad H_{ij}c_j = Ec_i$$

Implementazione numerica

Posso prendere

$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

oppure

$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

nell'intervallo $[-L/2, L/2]$. Se so in precedenza che le autofunzioni hanno una parità definita. Gli elementi di matrice, nel secondo caso, saranno

$$\frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi}{L} ix\right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} j\right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

Calcolo poi gli autovalori di $\hat{H}$ e i c_j, e le autofunzioni ψ saranno date da:

$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=1}^{N} c_j \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$