

Autovalori e autovettori

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

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

- Risolviamo l'equazione secolare

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

- Trasformazioni di similarità

$$\det(SAS^{-1} - \lambda I) = \det(SAS^{-1} - \lambda SS^{-1}) =$$

$$\det(S(A - \lambda I)S^{-1}) = \det(S)\det(A - \lambda I)\det(S^{-1}) =$$

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

Una trasformazione di similarità non altera gli autovalori

Autovettori

Parto da

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

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

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

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

$$A_{ik}S_{kj}^{-1} = \Lambda_{ik}S_{kj}^{-1} = \lambda_i S_{ij}^{-1}$$

$$A_{ik}u_k^{(j)} = \lambda_j u_i^{(j)}$$

che, in notazione vettoriale è

$$A\vec{u}^{(j)} = \lambda_j \vec{u}^{(j)}$$

Perciò i vettori colonna di S^{-1} sono gli autovettori di A .

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.

In pratica

Per risolvere il problema degli autovalori e autovettori conviene fare un certo numero di passi che rendono via via la matrice sempre più vicina alla forma diagonale, attraverso successive trasformazioni di similarità T_1, T_2, \dots, T_n

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

Da cui si ricava che

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

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

Matrici simmetriche

- Le matrici simmetriche o, meglio, hermitiane, sono quelle che ci interessano nei problemi di fisica, specialmente quantistica.
- Esistono n autovalori reali o complessi, magari coincidenti, per una matrice di ordine n
- Le matrici simmetriche reali ($a_{ij} = a_{ji}$ con a_{ij} reale) 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

$$\sum_{ij=1}^n a_{ij}^2 = \text{Tr}(AA^\dagger)$$

Infatti, la trasformazione ortogonale di similarità e la proprietà ciclica della traccia permettono di scrivere

$$\text{Tr}(UAU^\dagger UA^\dagger U^\dagger) = \text{Tr}(UAA^\dagger U^\dagger) = \text{Tr}(U^\dagger UAA^\dagger) = \text{Tr}(AA^\dagger)$$

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 trascurabili. 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 $n = 3$ scrivendo c per $\cos(\theta)$ e s per $\sin(\theta)$ è

$$\begin{pmatrix} c & 0 & s \\ 0 & 1 & 0 \\ -s & 0 & c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & a_{02} \\ a_{01} & a_{11} & a_{12} \\ a_{02} & a_{12} & a_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c & 0 & -s \\ 0 & 1 & 0 \\ s & 0 & c \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} c^2 a_{00} + s^2 a_{22} + 2csa_{02} & ca_{01} - sa_{12} & (c^2 - s^2)a_{02} + cs(a_{22} - a_{00}) \\ ca_{01} - sa_{12} & a_{11} & sa_{01} + ca_{12} \\ (c^2 - s^2)a_{02} + cs(a_{22} - a_{00}) & sa_{01} + ca_{12} & s^2 a_{00} + c^2 a_{22} - 2csa_{02} \end{pmatrix}$$

Imponendo ora che $a'_{02} = 0$ dopo la rotazione, troverei che la somma dei nuovi elementi di matrice fuori dalla diagonale è'

$$2(ca_{01} - sa_{12})^2 + 2(sa_{01} + ca_{12})^2 = 2(a_{01}^2 + a_{12}^2)$$

ed è quindi minore della somma precedente

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 ($c = \cos(\theta)$ $s = \sin(\theta)$)

$$\begin{aligned}a'_{ki} &= c a_{ki} - s a_{kj}, & a'_{kj} &= c a_{kj} + s a_{ki} \quad k \neq i, j \\a'_{ii} &= c^2 a_{ii} + s^2 a_{jj} - 2 s c a_{ij}, & a'_{jj} &= c^2 a_{jj} + s^2 a_{ii} + 2 s c a_{ij} \\a'_{ij} &= (c^2 - s^2) a_{ij} + s c (a_{ii} - a_{jj})\end{aligned}$$

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

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

- questo valore di θ e' dato dalla condizione

$$\begin{aligned}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) a_{ij} &= \cos(2\theta) a_{ij} = \\ \sin \theta \cos \theta (a_{jj} - a_{ii}) &= \frac{1}{2} \sin(2\theta) (a_{jj} - a_{ii})\end{aligned}$$

e quindi

$$\tan(2\theta) = a_{ij} / (a_{jj} - a_{ii})$$

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 essere 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 similitudine

$$P_{N-2} \cdot P_{N-3} \dots P_2 \cdot P_1$$

Suppongo, per ogni vettore \vec{x} di modulo x di poter trovare una matrice P con le seguenti tre caratteristiche:

- $P^2 = 1$
- P è simmetrica
- $(P\vec{x})_i = 0$ se $i \neq 0$

Considero allora la matrice A che voglio ridurre in forma tridiagonale e prendo come vettore \vec{x} il vettore di $N - 1$ elementi le cui componenti sono

$$x_0 = a_{10} \quad x_1 = a_{20} \quad \dots \quad x_{N-1} = a_{N0}$$

e la matrice $P^{(1)}$ sia quella con le proprietà definite prima. Definisco la matrice P come

$$P = \begin{pmatrix} 1 & \vec{0} \\ \vec{0} & P^{(1)} \end{pmatrix}$$

Il prodotto PAP è una trasformazione di similarità perché $P = P^{-1}$ e inoltre è ancora una matrice simmetrica perché lo sono sia P che A .

$$(PAP)_{ij} = P_{ik}A_{kl}P_{lj} = P_{ki}A_{lk}P_{jl} = P_{jl}A_{lk}P_{ki} = (PAP)_{ji}$$

Calcolo ora il prodotto PA

$$(PA)_{0i} = P_{0j}A_{ji} = \delta_{0j}A_{ji} = A_{0i}$$

$$(PA)_{i>0,0} = P_{i0}A_{00} + \sum_{j=1}^{N-1} P_{ij}A_{j0} = \sum_{j=1}^{N-1} P_{ij}A_{j0} = (P^{(1)}\vec{x})_i$$

quest'ultima da zero se i è diverso da 1. Il valore di PA_{ij} per i e j entrambi compresi tra 1 ed $N-1$ non è importante qui. In conclusione

$$PA = \begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} \dots a_{0,N-1} \\ a'_{10} & \\ 0 & \text{Non interessa} \\ \vdots & \\ 0 & \end{pmatrix}$$

Moltiplico ora il risultato ancora per P

$$(PAP)_{00} = (PA)_{0j}P_{j0} = A_{0j}\delta_{j0} = A_{00}$$

$$(PAP)_{i0} = (PA)_{ij}P_{j0} = (PA)_{ij}\delta_{j0} = (PA)_{i0}$$

$$(PAP)_{0i} = (PA)_{0j}P_{ji} = A_{00}P_{0i} + \sum_{j=1}^{N-1} A_{0j}P_{ji} = \sum_{j=1}^{N-1} P_{ij}A_{j0} = (P^{(1)}\vec{x})_i$$

Quest'ultimo è nuovamente nullo quando $i > 1$ e quindi la matrice A dopo le due moltiplicazioni diventa

$$PAP = \begin{pmatrix} a_{00} & a'_{01} & 0 & \dots & 0 \\ a'_{10} & & & & \\ 0 & \text{Non interessa} & & & \\ \vdots & & & & \\ 0 & & & & \end{pmatrix}$$

A questo punto siamo sulla buona strada per rendere tridiagonale la nostra matrice. Dobbiamo ora ripetere il procedimento con una matrice P così fatta

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \vec{0} \\ 0 & 1 & \vec{0} \\ \vec{0} & \vec{0} & P^{(2)} \end{pmatrix}$$

$P^{(2)}$ essendo la matrice che annulla tutte le componenti salvo la prima del vettore \vec{x} tale che $x_0 = a_{21}x_1 = a_{31} \dots x_{N-2} = a_{N1}$. Resta ora da dimostrare che una matrice P con questi requisiti esiste. A questo scopo scelgo una matrice della forma

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

dove il vettore \vec{u} viene scelto opportunamente in funzione di \vec{x} e $H = \vec{u}^2 = \sum_{j=0}^{N-1} u_j^2$. È banale vedere che questa matrice è simmetrica. Dimostro che $P^2 = 1$.

$$\begin{aligned} P_{ik}P_{kj} &= \left(\delta_{ik} - 2\frac{u_i u_k}{H}\right)\left(\delta_{kj} - 2\frac{u_k u_j}{H}\right) \\ &= \delta_{ij} - 2\frac{u_i u_j}{H} - 2\frac{u_i u_j}{H} + 4\frac{u_i u_j}{H^2}\vec{u}^2 = \delta_{ij} \end{aligned}$$

Devo ora scegliere \vec{u} in modo opportuno perché $P\vec{x}$ abbia tutte le componenti nulle escluse la prima. detto \vec{e}_0 il versore del primo asse scelgo

$$\vec{u} = \vec{x} - x\vec{e}_0$$

da cui, prendendo il prodotto scalare con \vec{e}_0 ($x = \|\vec{x}\|$)

$$u_0 = x_0 - x$$

e facendo il quadrato

$$u^2 = H = x^2 + x^2 - 2xx_0 = 2x(x - x_0) = -2xu_0$$

$$(P\vec{x})_i = P_{ij}x_j = \left(\delta_{ij} - 2\frac{u_i u_j}{H}\right)(u_j + x\delta_{j0}) = u_i - 2u_i + x\delta_{i0} - 2x\frac{u_i u_0}{H}$$

$$(P\vec{x})_0 = x - u_0 - 2x\frac{u_0^2}{H} = x - u_0\left(1 + 2\frac{xu_0}{H}\right) = x$$

$$(P\vec{x})_{i>0} = -u_i - 2x\frac{u_i u_0}{H} = u_i\left(1 + 2\frac{xu_0}{H}\right) = 0$$

che conclude la prova

Calcolo pratico

- Considero gli elementi a_{ij} della colonna che voglio ridurre a forma tridiagonale
- Trovo u_j dalle formule precedenti normalizzo \vec{u} (d'ora in avanti suppongo $H = 1$)
- 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

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

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.