

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

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

Una trasformazione di similarità non altera gli autovalori

Autovettori

Parto da

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

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

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

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

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

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

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, \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

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

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

- Faccio un gran numero di trasformazioni unitarie
- Ognuna di queste diminuisce gli elementi di matrice non diagonali
- Alla fine otterrò una matrice che ha gli autovalori sulla diagonale principale ed è nulla altrove

La trasformazione elementare T_{ij} con $i < j$ differisce dalla matrice unità solo per

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

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 ;
- Se la trasformazione è T_{ij} questa modifica la matrice secondo la regola:

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

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

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

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

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

- Scelgo P della forma

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

$$\text{con } \|u\| = 1$$

- $P^2 = I$ Infatti

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

- Ne segue che $P = P^{-1}$ e la trasformazione di similitudine 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

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

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

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

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

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

cambia segno tante volte quanti sono gli autovalori minori di λ

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

$$\sum_{j=1}^N c_j \int u_i(x) \hat{H} u_j(x) dx = E \sum_{j=1}^N c_j \delta_{ij} = E c_i$$

$$\sum_{j=1}^N H_{ij} c_j = E c_i$$

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:

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

Riscaldare le equazioni

- Gestire con il computer piccole o grandi costanti fisiche è complicato
- Cerco di liberarmene riscaldando le equazioni
- Per l'oscillatore armonico questo significa scrivere $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ed $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$

- L'equazione di Schrödinger diventa

$$\psi''(\xi) - \xi^2\psi(\xi) = -\varepsilon\psi(\xi)$$

- Se l'oscillatore ha autovalori $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$ quello riscaldato ha autovalori $\varepsilon_n = 2n + 1$
- calcolando separatamente gli autovalori relativi ad autovettori pari e dispari, mi aspetto le sequenze 3,7,11,... oppure 1,5,9...

Test

Si possono fare alcune verifiche ed esercizi

- per $\omega = 0$ gli elementi di matrice diversi da zero sono solo quelli diagonali
- per $\hbar = 0$ si potrebbero calcolare analiticamente gli integrali per parti
- i valori di L sono arbitrari, come pure l'ordine N della matrice che diagonalizziamo. È necessario verificare che il risultato finale non cambia se si incrementano L e N .
- quando ho trovato un autovalore seleziono quello più basso che so comportarsi come e^{-x^2}
- faccio un grafico dell'autofunzione in funzione di x
- ripeto tutto il procedimento per il potenziale

$$V(x) = -U_0 \quad -b/2 \leq x \leq b/2$$

ora l'aver risolto l'oscillatore armonico funge da test!