Autovalori e autovettori

Se esiste un vettore x per cui

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

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

- Gli autovalori sono soluzioni dell'equazione secolare

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

- Le trasformazioni di similarità non cambiano gli autovalori

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

- Gli autovettori sono invece cambiati

$$Ax = \lambda x \quad \Rightarrow \quad SAx = S\lambda x \quad \Rightarrow \quad SAS^{-1}Sx = \lambda Sx$$

da qui si vede che il nuovo autovettore con autovalore λ è Sx

Autovettori

Suppongo di aver trovato la matrice S
che diagonalizza A

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

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

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

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

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

$$A_{ik}u^{(j)}_k = \lambda_j u^{(j)}_i \quad \Rightarrow \quad A\vec{u}^{(j)} = \lambda_j \vec{u}^{(j)}$$

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

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.

Iterazioni

Per risolvere il problema si possono effettuare trasformazioni consecutive $T_1, T_2, ...T_n$ per cui

$$A_1 = T_1 A T_1^{-1} \quad A_2 = T_2 A_1 T_2^{-1} = T_2 T_1 A T_1^{-1} T_2^{-1} = (T_2 T_1) A (T_2 T_1)^{-1}$$

per arrivare ad ottenere, dopo n, iterazioni, una matrice in forma diagonale

$$\begin{aligned} \Lambda &= T_n \cdot T_{n-1} \ldots T_1 \cdot A \cdot T_1^{-1} \ldots T_{n-1}^{-1} T_n^{-1} \\ &= (T_n \cdot T_{n-1} \ldots T_1) \cdot A \cdot (T_n \cdot T_{n-1} \ldots T_1)^{-1} \end{aligned}$$

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 ed hermitiane

- Le matrici simmetriche hanno $a_{ij} = a_{ji}$ e quelle hermitiane $a_{ij} = a^*_{ji}$

- Se il loro ordine è n hanno sempre n autovalori reali (simmetriche) o complessi coniugati (hermitiane)

- Alcuni autovalori possono coincidere

- La matrice U che le diagonalizza è una matrice unitaria ($U^\dagger \cdot U = U \cdot U^\dagger = 1$).

Rotazioni di Jacobi

Una trasformazione unitaria conserva la quantità

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

- 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:

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

- 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

Alternativamente si può usare la decomposizione LU per trovare autovalori e autovettori

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

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

e trovo

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

facendo il quadrato e sommando su j

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

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

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

Moltiplicando per a_{12} la prima equazione e per a_{1j} la seconda e sommando su j ottengo

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

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 $u_1 = 0$, $u_1 = u_2 = 0$, $u_1 = u_2 = u_3 = 0$, in modo da non modificare la colonna 1, 2, 3, ... 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

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

Questo mi permette di restringere la ricerca degli autovalori in un intervallo noto

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. Ciò 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 la prima equazione a destra per $u_i(x)$ e integrando trovo
$$\sum_{j=1}^{N} \quad c_j \int u_i(x)\hat{H}u_j(x)\,dx = E\sum_{j=1}^{N} c_j\delta_{ij} = Ec_i$$
$$\sum_{j=1}^{N} \quad H_{ij}c_j = Ec_i$$

Implementazione numerica

- Non posso studiare il problema in un intervallo infinito, perciò devo rinchiudere il mio sistema nell'intervallo $[-L/2, +L/2]$.

- Le soluzioni dell'equazione di una particella libera, che posso utilizzare come base, sono
$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$
oppure
$$u_j(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

- Il potenziale armonico e simmetrico rispetto allo scambio $x \to -x$ e quindi la parità sarà conservata; perciò, se parto da una base di funzioni pari trovarò autovettori pari, e analoga situazione vale per una base dispari.

- Posso quindi limitarmi, per esempio, agli autovettori pari Gli elementi di matrice, in questo caso, saranno
$$\frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \cos\left(\frac{2\pi}{L} ix\right) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} j\right)^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

- A questo punto posso calcolare gli autovalori di $\hat{H}$ e i c_j, e le autofunzioni ψ saranno date da:
$$\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{j=1}^{N} c_j \cos\left(\frac{2\pi}{L} jx\right)$$

Riscalare le equazioni

- Gestire con il computer piccole o grandi costanti fisiche è complicato
- Cerco di liberarmene riscalando 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 riscalato ha autovalori $\varepsilon_n = 2n + 1$
- calcolando separatamente gli autovalori relativi ad autovettori pari e dispari, mi aspetto le sequenze 3,7,11,... oppre 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

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

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