

## WEKTORY I WARTOŚCI WŁASNE MACIERZY

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \lambda\mathbf{c} \quad (*)$$

$$(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{c} = 0$$

nietrywialne rozwiązanie gdy

$$\det|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}| = 0$$

problem przybliżonego rozwiązania zagadnienia własnego dla operatorów w mechanice kwantowej

$\mathbf{A}$  - macierzowa reprezentacja operatora  $\hat{A}$

w skończonej ortonormalnej bazie funkcyjnej  $\{\varphi_i\}$

$$\mathbf{A}_{ij} = \langle i | \hat{A} | j \rangle = \int \varphi_i^*(\tau) \hat{A} \varphi_j(\tau) d\tau$$

- metoda wariacyjna Ritz'a
- rachunek zaburzeń dla stanów zdegenerowanych

$$\mathbf{c} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{bmatrix}$$

**wektor współczynników rozwinięcia**

$$\Psi = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i$$

**mechanika kwantowa:**

**hermitowskie (symetryczne) operatory mierzalnych wielkości fizycznych; głównie macierze symetryczne**

**podstawowe definicje i twierdzenia algebry macierzowej (przypomnienie):**

**def.**

**Macierze  $\mathbf{A}$  i  $\mathbf{B}$  ( $n \times n$ ) są podobne gdy istnieje nieosobliwa macierz  $\mathbf{S}$  ( $\det|\mathbf{S}| \neq 0$ ) taka, że  $\mathbf{A} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{S}$**

**def.**

**Jeśli  $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^T$  to  $\mathbf{S}$  jest ortogonalna (unitarna)**

**Tw.**

**Macierze podobne mają te same wartości własne;**

$$\mathbf{A}\mathbf{c} = \lambda\mathbf{c}, \quad \mathbf{B}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \quad \text{ i } \quad \mathbf{x} = \mathbf{S}\mathbf{c}$$

Tw.

Jeśli  $A$  jest macierzą symetryczną to istnieje ortogonalna macierz  $S$  taka, że  $D=S^TAS$  gdzie  $D$  jest macierzą diagonalną.

problem (\*) sprowadza się do znalezienia transformacji diagonalizującej  $A$

### Metody iteracyjne

#### Transformacja Jacobiego

##### 1. przypadek $n=2$

wyberzmy  $S$  w postaci:

$$S = \begin{pmatrix} \cos v & \sin v \\ -\sin v & \cos v \end{pmatrix}$$

istotnie  $S^T S = 1$

Jakie powinno być  $v$ , żeby

$$\begin{pmatrix} \cos v & -\sin v \\ \sin v & \cos v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p & r \\ r & q \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos v & \sin v \\ -\sin v & \cos v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

**z żądania 0 w pozadiagonalnym elemencie**

$$p \cos v \sin v + r \cos^2 v - r \sin^2 v - q \sin v \cos v = 0$$

$$\operatorname{tg}(2v) = \frac{2r}{q - p}$$

dla  $p=q$   $2v = \pi/2$   $v = \pi/4$

**2.  $n > 2$**

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} 1 & .. & 0 & .. & 0 & .. & 0 \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ 0 & .. & \cos v & .. & \sin v & .. & 0 \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ 0 & .. & -\sin v & .. & \cos v & .. & 0 \\ .. & .. & .. & .. & .. & .. & .. \\ 0 & .. & 0 & .. & 0 & .. & 1 \end{bmatrix}$$

i-ta  
kolumna

j-ta  
kolumna

$\mathbf{S}_k^T \mathbf{A} \mathbf{S}_k$  - eliminuje elementy  $\{j,i\}$  oraz  $\{i,j\}$

dotatkowo: zmianie ulegają tylko wiersze  $\{i\}, \{j\}$  oraz kolumny  $\{i\}, \{j\}$  -

- nie trzeba mnożyć trzech macierzy, z których dwie zawierają prawie same zera...
- wystarczy wyprowadzić wyrażenia na zmienione elementy w tych wierszach i kolumnach...

iteracyjnie usuwamy elementy pozadiagonalne tworząc ciąg transformacji

$$\mathbf{S}_k^T \mathbf{S}_{k-1}^T \dots \mathbf{S}_2^T \mathbf{S}_1^T \mathbf{A} \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \dots \mathbf{S}_{k-1} \mathbf{S}_k$$

ostatecznie transformacja  $\mathbf{S}$  diagonalizująca  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 \dots \mathbf{S}_{n-1} \mathbf{S}_n$$

- w każdym kroku wybieramy największy element pozadiagonalny
- w kolejnych krokach mogą ulec zmianie elementy wcześniej wyzerowane
- ale można udowodnić, że

$$\sum_{m \neq n} |a_{mn}^{(k+1)}|^2 < \sum_{m \neq n} |a_{mn}^{(k)}|^2$$

- metoda jest wolno zbieżna
- ciąg kolejnych transformacji diagonalizujący (zerujący pozadiagonalne elementy) z żadaną dokładnością

ale daje

- wszystkie wartości własne

kolumny **S** zawierają kolejne wektory własne:  
jeśli przez **X** oznaczyć macierz złożoną z kolumn  
wektorów własnych, to

$$\mathbf{A} \mathbf{X} = \mathbf{D} \mathbf{X}$$

gdyż

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & .. & 0 \\ .. & .. & .. \\ 0 & .. & \lambda_n \end{bmatrix}$$

i

$$\mathbf{X}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{X} = \mathbf{D}$$

a to oznacza, że  $\mathbf{S}=\mathbf{X}$

### Metoda Householdera i algorytm QL

- sprowadzenie **A** do postaci trójdiagonalnej **T**  
o takich samych wartościach własnych jak **A**  
( za pomocą szeregu transformacji ortogonalnych )

niech **U** będzie dowolnym wektorem o wym.  $m \leq n$

macierz Householdera

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - 2 \mathbf{u} \mathbf{u}^T$$

macierz  $\mathbf{I}$  ma wymiar  $n \times n$

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_m \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 & u_2 & \dots & u_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1^2 & u_1 u_2 & \dots & u_1 u_m \\ u_1 u_2 & u_2^2 & \dots & u_2 u_m \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ u_1 u_m & u_2 u_m & \dots & u_m^2 \end{pmatrix}$$

(do wymiaru  $n$  można uzupełnić diagonalnie)

np. dla  $n=m+1$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1^2 & \dots & u_1 u_m \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & u_1 u_m & \dots & u_m^2 \end{pmatrix}$$

to  $\mathbf{P} = \mathbf{P}^T$ , wybierając  $\mathbf{u}$  tak, że  $|\mathbf{u}|^2 = 1$

to  $\mathbf{P} \mathbf{P} = \mathbf{1}$  czyli  $\mathbf{P} = \mathbf{P}^{-1}$

jest tak ponieważ  $(\mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T)(\mathbf{I} - 2\mathbf{u}\mathbf{u}^T) = \mathbf{I} - 4\mathbf{u}\mathbf{u}^T + 4\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{u}\mathbf{u}^T$ ,  $\mathbf{u}^T\mathbf{u} = |\mathbf{u}|^2$

zatem  $\mathbf{P}$  jest ortogonalna

jeśli  $|\mathbf{u}|^2 \neq 1$  to

$$\mathbf{P} = \mathbf{I} - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}^T}{H}$$

gdzie

$$H = \frac{1}{2} |\mathbf{u}|^2$$

przy czym przez  $|\mathbf{u}|^2$  należy rozumieć:

$$|\mathbf{u}|^2 = (u_1 \quad u_2 \quad \dots \quad u_m) \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \dots \\ u_m \end{pmatrix}$$

można pokazać, że wybierając

$$(*1) \quad \mathbf{u} = \mathbf{x} \mp |\mathbf{x}| \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{X} - \text{dowolny wektor}$$

to

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \pm |\mathbf{x}| \mathbf{e}_i$$

tzn.

$\mathbf{P}$  wyzerowuje z  $\mathbf{X}$  wszystko za wyjątkiem elementu na  $i$ -tej pozycji.

dowód:

(wyberzmy znak + )



korzystamy z faktu, że  $|u|^2 = u^T u = 2|x|(|x|+x_i)$  (A)  
 (gdyż  $x e_i = x_i$ )

oraz, że  $u^T |x| e_i = |x|(|x|+x_i)$ , (B)

zatem

$$\begin{aligned} Px &= |x| - 2uu^T x / (u^T u) = [z \text{ def. } *1] = x - 2uu^T (u - |x|e_i) / (u^T u) = \\ &= [z \text{ A i B}] = x - 2u + 2u(|x|(|x|+x_i)) / (2|x|(|x|+x_i)) = x - 2u + u = \\ &= [z \text{ def. } 1^*] = - |x|e_i . \end{aligned}$$

Wybierając  $X$  jako  $\begin{pmatrix} a_{21} \\ a_{31} \\ \dots \\ a_{n1} \end{pmatrix}$  z kolumny (1)  $A$

(zauważmy, że  $m=n-1$  i do wymiaru  $n$  uzupełniamy  $P$  jako  $I$ )  
 oraz biorąc  $i = 1$  (2 gdy mamy na myśli całą kolumnę z  $A$ )

$$\begin{array}{c|cccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{array} \quad \mathbf{P}$$

zbudowane z  $X$   $P_1$  :

$$\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ k & & & & \\ 0 & & & & \\ \dots & & & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}$$

(  $k$  jest z dokładnością do znaku równe  $|x|$  )

i zmodyfikuje pozostałe elementy w bloku  $(2,3,\dots,n) \times (2,3,\dots,n)$

a

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{P}_1 = \begin{bmatrix} a_{11} & k & 0 & \dots & 0 \\ k & & & & \\ 0 & & & & \\ \dots & & & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix}$$

kolejne  $\mathbf{P}_2$  budujemy w oparciu o  $\mathbf{X}$  z  $\mathbf{A}^{(1)}$

- nie z całej  $\mathbf{A}^{(1)}$  lecz z bloku o wym.  $(m = n-2)$  –

począwszy od 3-ciej kolumny i 3-go wiersza

$$\begin{pmatrix} a_{31}^{(1)} \\ a_{41}^{(1)} \\ \dots \\ a_{n1}^{(1)} \end{pmatrix}$$

a ciąg operacji  $P = P_1 P_2 \dots P_{n-2}$

ortogonalnych, trójdzielizuje ściśle  $A$  do  $T$

$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \bullet & \bullet & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \bullet \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \bullet & \bullet \end{bmatrix}$$

skończona liczba (n-1) operacji

• diagonalizacja macierzy  $T$

niech  $J_n$  w działaniu na  $T$  ( $J_n T$ )  
dokonuje obrotu Jacobiego (lewego),  
wyzerowując element  $(n-1, n)$ ;

w dolnym trójkącie  $T$  pojawi się  $T_{n,n-2} \neq 0$

ponieważ

$$\begin{array}{ccc} \dots, & \dots, & \dots \\ \dots, & \dots, & \dots \end{array}$$

$$\begin{aligned} & \dots, \mathbf{0}, T_{n-2,n-3}, T_{n-2,n-2}, T_{n-2,n-1}, \mathbf{0} \\ & \dots, \mathbf{0}, \mathbf{0}, T_{n-1,n-2}, T_{n-1,n-1}, \mathbf{0} \\ & \dots, \mathbf{0}, \mathbf{0}, T_{n,n-2}, T_{n,n-1}, T_{n,n} \end{aligned}$$

mnożone z lewej strony przez macieź Jacobiego posiadającą  $\cos(v)$ ,  $\sin(v)$ ,  $-\sin(v)$ ,  $\cos(v)$  na elementach o indeksach  $n-1$ ,  $n$  zerująca element  $T_{n-1,n}$  może zmodyfikować  $\mathbf{0}$  (na tej pozycji)

wyzerowując kolejne elementy  $T_{k-1,k}$  obrotem  $J_k$

(XX)

$$L^{(1)} = J_2 J_3 \dots J_n T$$

otrzymujemy macierz trójkątną (lewą):

$$\begin{bmatrix} \bullet & 0 & .. & .. & .. & 0 \\ \bullet & \bullet & 0 & .. & .. & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet & 0 & .. & 0 \\ 0 & \bullet & \bullet & \bullet & .. & .. \\ .. & .. & .. & .. & .. & 0 \\ 0 & .. & 0 & \bullet & \bullet & \bullet \end{bmatrix}$$

oznaczając  $Q^{(1)} = J_n^T J_{n-1}^T \dots J_2^T$   
możemy zapisać

$$T = Q^{(1)} L^{(1)} = T^{(1)}$$

(albo inaczej – mnożąc (XX) z lewej przez  $J_n^T J_{n-1}^T \dots J_2^T$ )

zauważmy też, że  $(J_2 J_3 \dots J_n)^T = J_n^T J_{n-1}^T \dots J_2^T = (Q^{(1)})^T = (Q^{(1)})^{-1}$   
bo  $Q^{(1)}$  jako seria macierzy Jacobiego jest ortogonalna,

= faktoryzacja  $\mathbf{T}$  na (m. ortog.) x (m. trójkątna)

i  $\mathbf{T}$  nazwiemy w tym etapie  $\mathbf{T}^{(1)}$ ,

ale pomnożenie  $\mathbf{Q}$  z lewej przez  $\mathbf{L}$ :

da  $\mathbf{T}^{(2)} = \mathbf{L}^{(1)} \mathbf{Q}^{(1)}$

jest ponownie macierzą trójdziagonalną gdyż

$$\mathbf{T}^{(2)} = \mathbf{J}_2 \mathbf{J}_3 \dots \mathbf{J}_n \mathbf{T}^{(1)} \mathbf{J}_n^T \mathbf{J}_{n-1}^T \dots \mathbf{J}_2^T$$

• proces iteracyjny:

$\mathbf{T}^{(k)}$  jest faktoryzowana  $\mathbf{T}^{(k)} = \mathbf{Q}^{(k)} \mathbf{L}^{(k)}$

$$\mathbf{T}^{(k+1)} = \mathbf{L}^{(k)} \mathbf{Q}^{(k)}$$

aż do otrzymania wyzerowania z żadaną dokładnością

### Znajdowanie pojedynczych wartości własnych

• szukanie "zer" wielomianu

$$P_n(\lambda) = \det|\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}|$$

metoda potęgowa

szukamy jednej (wybranej) wartości własnej

- założymy, że interesuje nas dominująca wartość

niech  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  wartości własne  $\mathbf{A}$

$\{\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{v}^{(2)}, \dots, \mathbf{v}^{(n)}\}$  wektory własne

(wzajemnie ortogonalne dla  $\mathbf{A}$  symetrycznej)

niech  $|\lambda_1| > |\lambda_2| \dots \geq \dots |\lambda_n| \geq 0$

dowolny wektor  $\mathbf{x}$  w  $\mathbf{R}^n$

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbf{v}^{(i)}$$

zauważmy, że mnożąc przez  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{A}^2$ , .....  $\mathbf{A}^k$

i z faktu, że  $\mathbf{A} \mathbf{v}^{(i)} = \lambda_i \mathbf{v}^{(i)}$

$$\mathbf{A}^k \mathbf{x} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k \mathbf{v}^{(i)}$$

$$\mathbf{A}^k \mathbf{x} = \lambda_1^k \sum_{i=1}^n \alpha_i \left( \frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k \mathbf{v}^{(i)}$$

zatem

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{A}^k \mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{v}^{(1)} \lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_1^k$$

bo wyrazy w sumie dla  $i > 1$  zbiegają do zera;

i jest zbieżne do zera dla  $|\lambda_1| < 1$

wyberzmy  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{(0)}$  - unormowany do jedności

(przy  $\|\mathbf{x}\| = \max \{ |x_i| \}$  )

ze składową  $p_0$   $x_{p_0}^{(0)} = 1$

niech  $\mathbf{y}^{(1)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(0)}$

i unormowany  $\mathbf{y}^{(1)}$  oznaczmy  $\mathbf{x}^{(1)}$

$$\mathbf{x}^{(1)} = \frac{\mathbf{y}^{(1)}}{y_{p_1}^{(1)}} \quad \text{gdzie} \quad |y_{p_1}^{(1)}| = \|\mathbf{y}^{(1)}\|$$

a indeks  $p_1$  wskazuje tę współrzędną  $\mathbf{y}$ ,  
której  $|\cdot|$  jest największa

zatem

$$\|\mathbf{x}^{(1)}\| = 1$$

powtórzmy to samo dla  $\mathbf{x}^{(1)}$

$$\mathbf{y}^{(2)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} = \frac{1}{y_{p_1}^{(1)}} \mathbf{A}^2 \mathbf{x}^{(0)}$$

i utwórzmy  $\mathbf{x}^{(2)}$  analogicznie jak  $\mathbf{x}^{(1)}$

$$\mathbf{x}^{(2)} = \frac{\mathbf{y}^{(2)}}{y_{p_2}^{(2)}} = \frac{1}{y_{p_2}^{(2)} y_{p_1}^{(1)}} \mathbf{A}^2 \mathbf{x}^{(0)}$$

po  $m$  krokach



$$\mathbf{X}^{(m)} = \frac{\mathbf{A}^m \mathbf{X}^{(0)}}{\prod_{k=1}^m y^{(k)}_{p_k}}$$

tworząc w każdym kroku  $\mathbf{X}^{(k)}$

dzieliliśmy  $\mathbf{y}^{(k)}$  przez największą jego współrzędną w celu unormowania do  $\mathbf{X}^{(k)}$

Zobaczmy

czym są w kolejnych krokach wielkości zdefiniowane jako:

$$\mu^{(m)} = y^{(m)}_{p_{m-1}}$$

tzn. ta współrzędna  $\mathbf{y}^{(m)}$ , która wyznaczała normę poprzedniego  $\mathbf{y}^{(m-1)}$

$$\mu^{(1)} = \frac{y^{(1)}_{p_0}}{x^{(0)}_{p_0}} = \frac{\alpha_1 \lambda_1 v^{(1)}_{p_0} + \sum_{j=2}^n \alpha_j \lambda_j v^{(j)}_{p_0}}{\alpha_1 v^{(1)}_{p_0} + \sum_{j=2}^n \alpha_j v^{(j)}_{p_0}}$$

$$= \lambda_1 \left[ \frac{\alpha_1 v^{(1)}_{p_0} + \sum_{j=2}^n \alpha_j (\lambda_j / \lambda_1) v^{(j)}_{p_0}}{\alpha_1 v^{(1)}_{p_0} + \sum_{j=2}^n \alpha_j v^{(j)}_{p_0}} \right]$$

dla kroku  $m$

$$\mu^{(m)} = \lambda_1 \left[ \frac{\alpha_1 v^{(1)}_{p_{m-1}} + \sum_{j=2}^n \alpha_j (\lambda_j / \lambda_1)^m v^{(j)}_{p_{m-1}}}{\alpha_1 v^{(1)}_{p_{m-1}} + \sum_{j=2}^n \alpha_j (\lambda_j / \lambda_1)^{m-1} v^{(j)}_{p_{m-1}}} \right]$$

z faktu, że  $|\lambda|_1$  jest największe

$$\lim_{m \rightarrow \infty} \mu^{(m)} = \lambda_1$$

dodatkowo

można pokazać, że szereg  $\left\{ \mathbf{x}^{(m)} \right\}_{m=0}^{\infty}$

zbiega się do unormowanego wektora własnego

**A** odpowiadającego wartości własnej  $\lambda_1$

wybierając dowolny unormowany  $\mathbf{x}^{(0)}$

możemy po  $m$  iteracjach "zbliżyć się"  
z żadaną dokładnością do wektora własnego  
odpowiadającego największej wartości własnej

Inna wersja metody

**odwrotna metoda potęgowa**

pozwała uzbieżnić proces do wartości własnej  
(i odpowiadającego wektora własnego)

najbliższej danej liczbie  $q$

... program JACOBI\_POT ...