Sajátértékek és sajátvektorok

A fizika numerikus módszerei I.

mf1n1a06- mf1n2a06

Csabai István

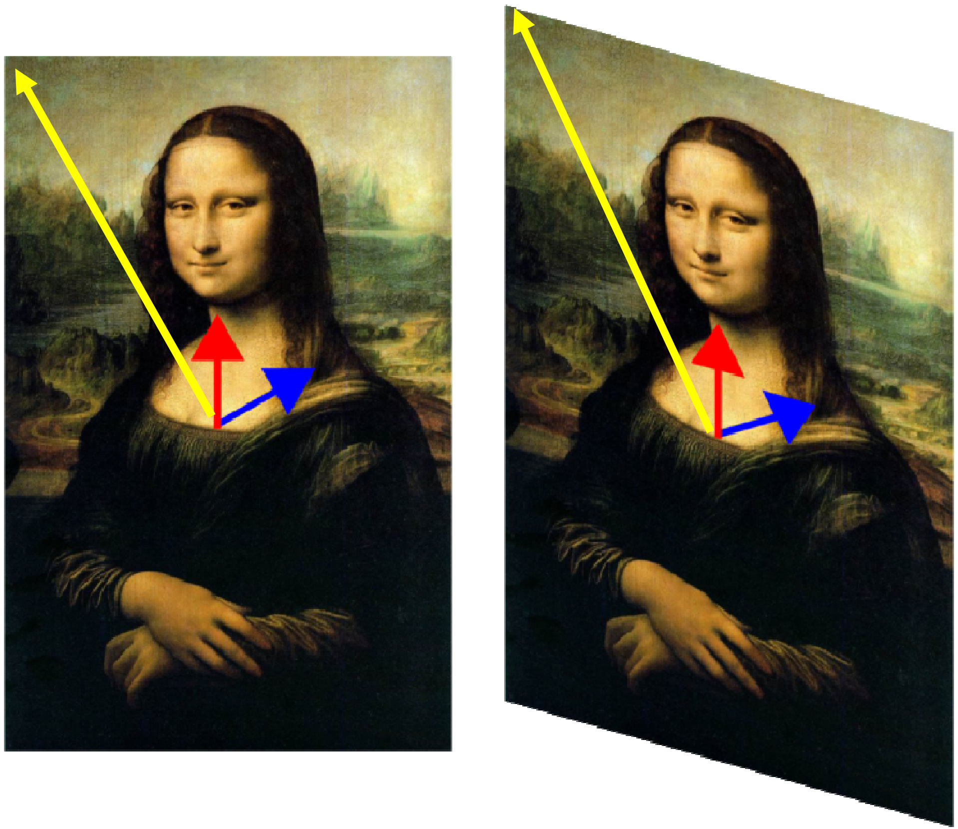
Lineáris transzformáció

$$Ax = b$$

- Vektorok lineáris transzformációja: általános esetben az x vektor iránya és nagysága változik
- Bizonyos vektorok iránya nem változik: ezek a sajátvektorok
- Ha a vektor hossza se változik, akkor a sajátérték értéke 1

$$Ax = \lambda x \qquad \lambda = const.$$

Példa: Mona Lisa „nyírása”



- A kép pixeleinek koordinátái 2 dimenziós vektorok
- A nyírás egy mátrixszal írható le
- A piros vektor sajátvektor
- Mivel hossza se változott, a hozzá tartozó sajátérték = 1
- Minden vele párhuzamos vektor is sajátvektor, vagyis egy sajátértékhez több eltolt sajátvektor tartozik
- A kék és sárga vektorok nem sajátvektorok

Sajátérték probléma

$$Ax = \lambda x$$

- Ismert $\mathbb{A}$ mátrix esetében keressük az ismeretlen x sajátvektorokat és az ismeretlen λ sajátértékeket
- Elvi megoldás: karakterisztikus polinom:

$$Ax - \lambda x = 0$$

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

- $\mathtt{NxN}$ mátrix esetében a karakterisztikus polinom $\mathtt{N}$-ed rendű, tehát $\mathtt{N}$ gyöke van
- Azaz a mátrixnak maximum $\mathtt{N}$ darab (komplex vagy valós) sajátértéke van
- Egy sajátértékhez több sajátvektor is tartozhat (a nulla vektor mindig megoldás)
- Sajátvektorok kiszámolhatóak a sajátérték behelyettesítése után kapott lineáris egyenletekből.

Két dimenzió: analitikus megoldás

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

- Csak akkor van nemtriviális (x!=0) megoldása, ha a determináns 0

$$\det(A - \lambda I) = 0 \qquad \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\lambda^2 - \lambda(a_{11} + a_{22}) + (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) = 0,$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2}\left[(a_{11} + a_{22}) \pm \sqrt{4a_{12}a_{21} + (a_{11} - a_{22})^2}\right].$$

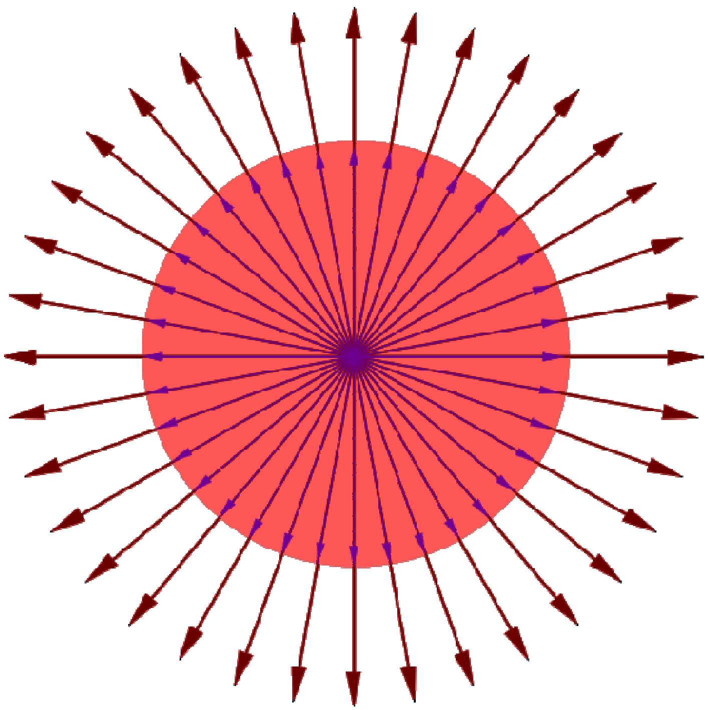
- Behelyettesítve a sajátértékeket, megkapjuk a sajátvektorokat

$$\left(\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} - \lambda \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\right) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{cases} (a_{11} - \lambda)\, x + a_{12} y = 0 \\ a_{21} x + (a_{22} - \lambda)\, y = 0 \end{cases}$$

- Lineáris egyenletrendszer

Középpontos nagyítás,identitás, középpontos tükrözés



$$A\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda \cdot x + 0 \cdot y \\ 0 \cdot x + \lambda \cdot y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda\mathbf{x},$$

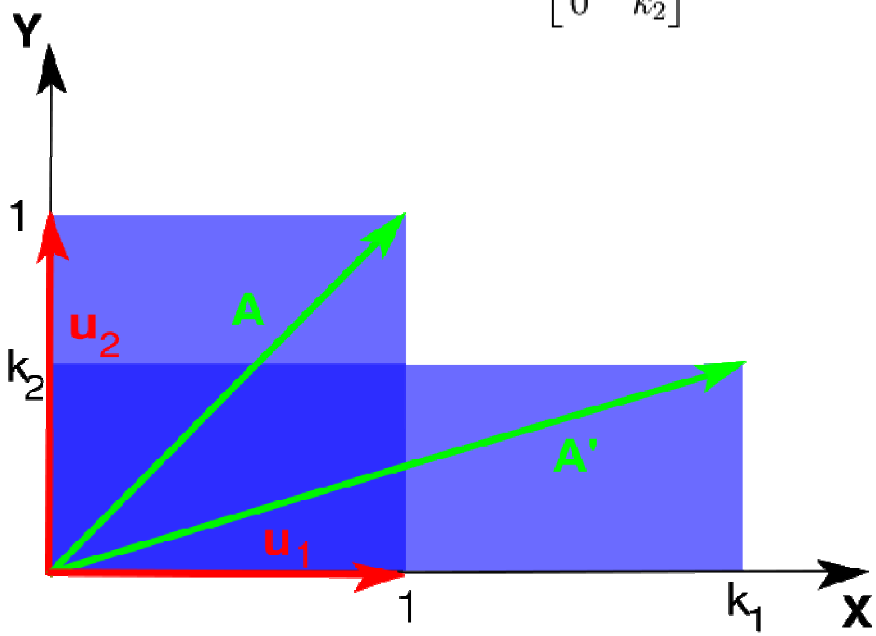
- Sajátértékek (λ) egybeesnek
- Minden vektor sajátvektor
- $\lambda = 1$: identitás
- $\lambda > 1$, $\lambda < 1$: középpontos nagyítás, kicsinyítés
- $\lambda = -1$: középpontos tükrözés
- $\lambda = 0$: null transzformáció: minden vektort 0-ba visz (nincs sajátvektor)

Egyenes nyújtás

$$\begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix}$$

$$Ax - \lambda x = 0$$

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



- Karakterisztikus polinom: $\lambda^2 - \lambda\,(k_1 + k_2) + k_1 k_2 = 0$.
- Gyökei: $\lambda_1 = k_1$, and $\lambda_2 = k_2$
- Sajátértékek: $\lambda_1 = k_1$, $\lambda_2 = k_2$
- Pl. $\lambda_2 = 0$, $\lambda_1 = 1$: vetítés
- Visszahelyettesítve k_1-et, megkapjuk a sajátvektorokat:

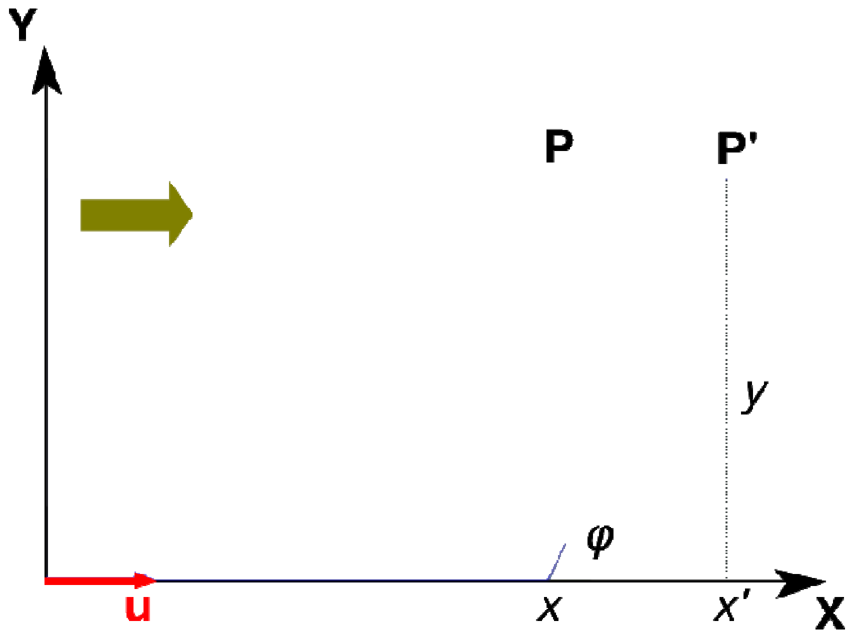
1. sajátvektor kiszámítása, lineáris egyenletrendszer megoldása:

$$\begin{bmatrix} k_1 - k_1 & 0 \\ 0 & k_2 - k_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{cases} (k_1 - k_1)\,x + 0.y \\ 0.x + (k_2 - k_1)\,y \end{cases} = (k_2 - k_1)\,y = 0.$$

Az első sajátvektor-tér tehát az y=0 vagyis az x tengely. Hasonlóan a másikra az y tengely jön ki.

Nyírás

$$\begin{bmatrix} 1 & k \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$



- A nyírás arányos *y-nal*, a nyírás szöge φ: $k = x' - x = y \operatorname{ctg}(\varphi)$
- Karakterisztikus polinom: $\lambda^2 - 2\lambda + 1 = (1 - \lambda)^2 = 0$
- Egy dupla (kétszeres multiplicitás) gyöke van: $\lambda = 1$
- 1 sajátvektora van: x

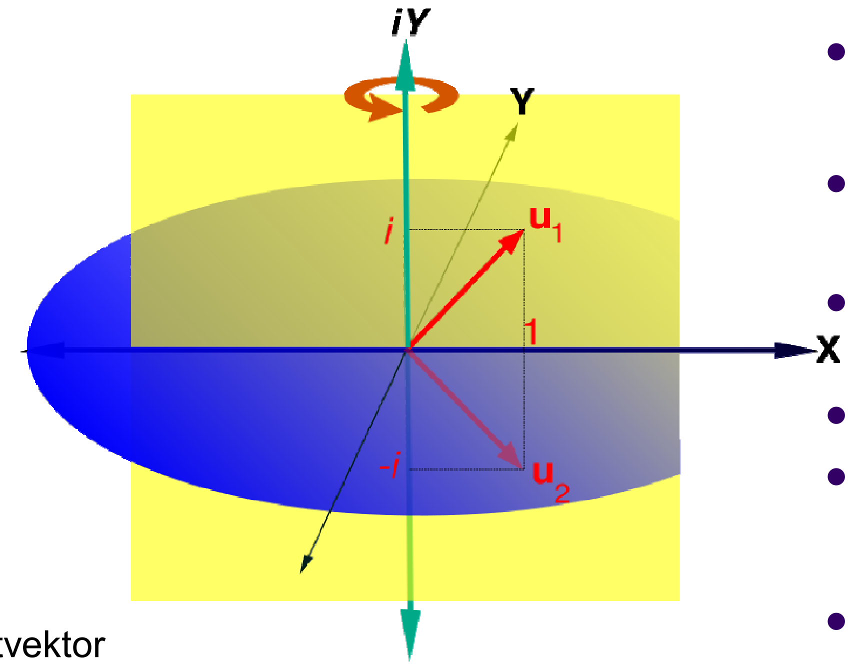
$$\begin{bmatrix} 1-1 & k \\ 0 & 1-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & k \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = ky = 0.$$

Másik irányú nyírás hasonló:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ k & 1 \end{bmatrix}$$

2D forgatás

$$R = \begin{bmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$$



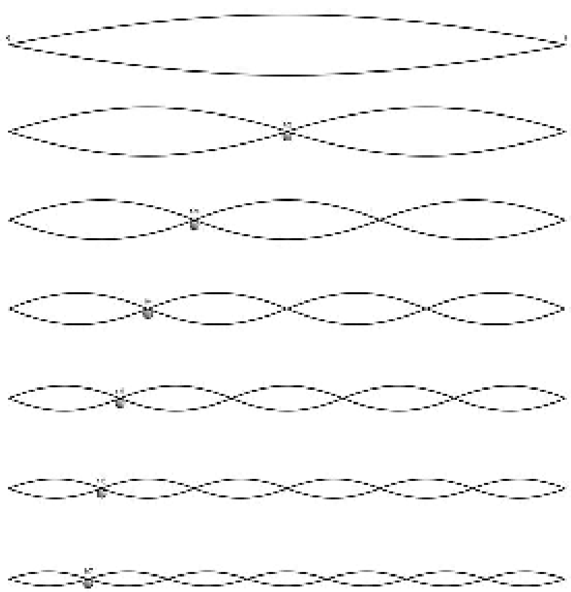
- Karakterisztikus polinom:
  $\lambda^2 - 2\lambda \cos\varphi + 1 = 0$
- A diszkrimináns:
  $D = 4(\cos^2\varphi - 1) = -4\sin^2\varphi$
- Negatív, kivéve ha: $180° \times k$;
  (k = 0, 1, 2, …)
- Nincs valós gyök, a sajátértékek komplexek
  $\lambda_{1,2} = \cos\varphi \pm i\sin\varphi = e^{\pm i\varphi}$
- Sajátvektorok is komplexek:
  $\mathbf{u}_1 = [\,1; i\,]$ és $\mathbf{u}_2 = [\,1; -i\,]$
- 0°, 360°, $\cos\varphi = 1$, $\sin\varphi = 0$: identitás
- 180°, 540°, …, $\cos\varphi = -1$, $\sin\varphi = 0$:
  tükrözés
- Fizika: tehetetlenségi nyomaték

Sajátvektor kiszámítása:

$$\begin{bmatrix} \cos\varphi - \lambda_1 & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i\sin\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & -i\sin\varphi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$$\begin{cases} ix\sin\varphi + y\sin\varphi = 0 \\ x\sin\varphi - iy\sin\varphi = 0 \end{cases}$$

Végtelen dimenzió, sajátfüggvéynek



- A folytonos x tengelyt D→∞ részre bontva
- Végtelen dimenziós sajátvektorok: sajátfüggvények
- Mátrix: operátor, függvényt függvénybe képez (pl. differenciáloperátor)
- Pl. harmonikus rezgés

$$F = ma = -kx \qquad m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -kx$$

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} + {\omega_0}^2 x = 0$$

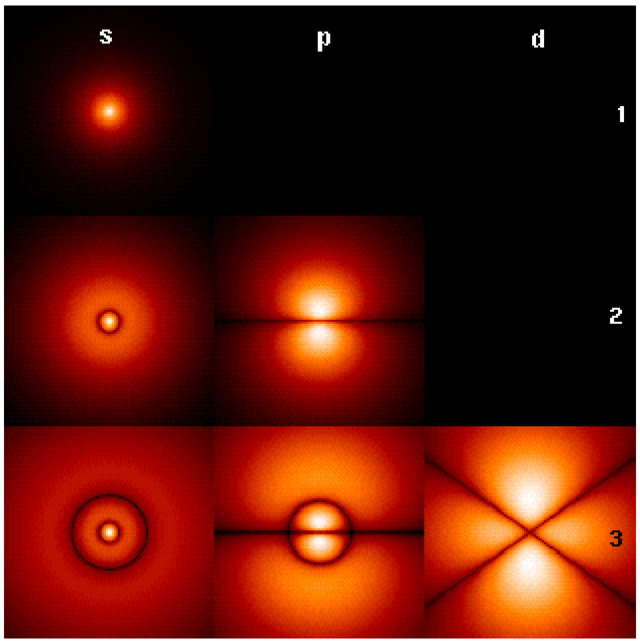
$$Ax = \lambda x \qquad A = \frac{d^2}{dt^2} \qquad \lambda = -\omega^2$$

$$x = A\sin(\omega_0 t + \phi)$$

- Határfeltételek által meghatározott harmonikus saját-rezgések
- Sajátértékek ($-\omega^2$) a frekvenciát adják

Schrödinger egyenlet

$$H\psi_E = E\psi_E$$

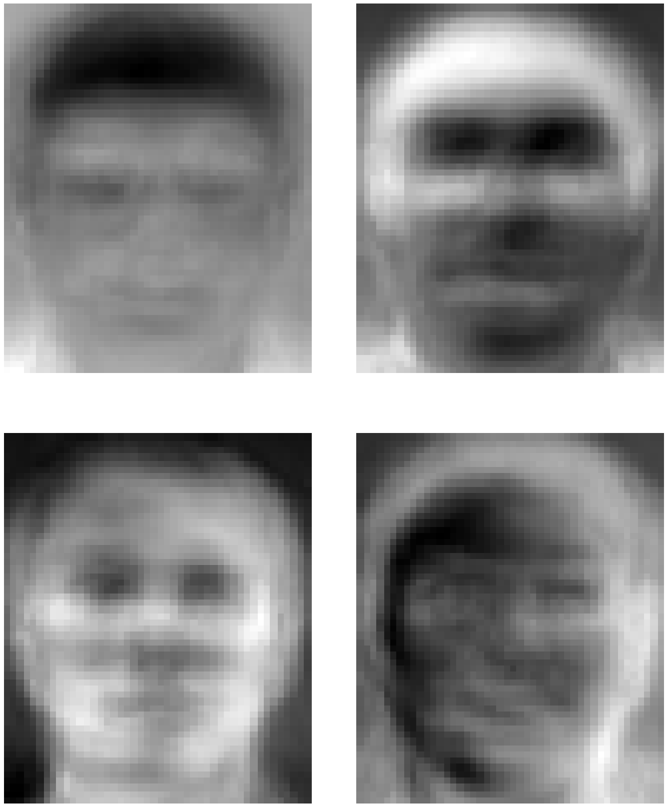


- Pl. atomok, molekulák elektronpályái, Hartree-Fock közelítés

$$\left[-\frac{1}{2}\sum_i \nabla_i^2 - \sum_{A,i}\frac{Z_A}{r_{Ai}} + \sum_{A>B}\frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + \sum_{i>j}\frac{1}{r_{ij}}\right]\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = E_{el}\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R}),$$

- H: Hamilton-operátor
E: sajátenergia

Főkomponens analízis



- Faktor analízis, PCA: principal component analysis
- Adat-vektorok fő irányainak meghatározása
- Pl. képfeldolgozás: „sajátarcok”
- Adattömörítés, zajcsökkentés, pl.Google page rank

Sajátérték probléma megoldása sok dimenzióban

- N<5: létezik explicit megoldása a karakterisztikus polinomnak (Abel-Ruffini)
- N>=5: a polinom gyökeinek direkt numerikus meghatározása, iteratív módon oldható csak meg, szinguláris lineáris egyenletrendszerre vezet. Numerikusan nagyon érzékeny, általában nem használják.
- Legnagyobb sajátérték: hatvány módszer
  - Tegyük fel hogy $|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge |\lambda_3| \ge \cdots \ge |\lambda_n|$
  - A sajátvektorok bázisán kifejtve: $$\bar{x} = \sum_{i=1}^{n} a_i \bar{x}^{(i)}$$ $$H\dot{x}^{(i)} = \lambda_i \dot{x}^{(i)}$$
  - Egyre magasabb hatványokra, az első sajátérték a többinél gyorsabban nő:

$$H\dot{x} = \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda_i \dot{x}^{(i)}, \quad H^k \dot{x} = \sum_{i=1}^{n} a_i \lambda_i^k \dot{x}^{(i)} \xrightarrow[k \to \infty]{} \lambda_1^k a_1 \dot{x}^{(1)}$$

- Mátrix diagonalizáció hasonlósági transzformációval: Jacobi transzformáció, QR módszer
  - Keressük azt a P mátrixot, amely az A mátrixot diagonális alakra hozza, a sajátértékek nem változnak, a diagonálisból leolvashatóak:

$$P^{-1}AP = A'$$

$$\begin{aligned} \det|P^{-1}AP - \lambda E| &= \det|P^{-1}(A - \lambda E)P| \\ &= \det P \det|A - \lambda E| \det|P^{-1}| \\ &= \det|A - \lambda E| \end{aligned}$$

Octave

- `[V, LAMBDA] = eig (A)`
- Példa:

```
octave:##> A=[5 7 9; -1 3 2; 2 5 8]
A =
   5   7   9
  -1   3   2
   2   5   8
octave:##> [v,lambda]=eig(A)
v =
  -0.042259   0.733901   0.831021
   0.796459  -0.600522   0.033678
  -0.603214   0.317432   0.555221
lambda =
   1.53832   0.00000   0.00000
   0.00000   3.16492   0.00000
   0.00000   0.00000  11.29676
```