Simplificação de matrizes dois por dois para fácil diagonalização

Há agora, em Nerdyard, uma boa coleção de postagens envolvendo a diagonalização de matrizes, no contexto de mecânica clássica (veja os links no final desta postagem). Porém, as técnicas ensinadas nessas publicações são de valia para outros cursos também, notadamente os de mecânica quântica. Aqui vou apresentar duas propriedades de matrizes dois por dois reais que, exploradas como explico abaixo, simplificam a diagonalização dessas matrizes. Uma dessas propriedades é como simetrizar uma matriz dois por dois qualquer. A outra é que sempre podemos alterar a diagonal principal dessas matrizes para poder encontrar autovalores de uma forma quase que instantânea, sem ter que usar a fórmula de Bhaskara. Uma ilustração desse método de simplificação está na videoaula Diagonalização rápida.

Vamos considerar uma matriz dois por dois real qualquer, M, que queremos diagonalizar:

$$M = \begin{bmatrix} a & c \\ d & b \end{bmatrix}. \qquad (1)$$

Para achar os autovalores, procedemos como explicado nas postagens Dois osciladores harmônicos acoplados e Diagonalizando uma matriz dois por dois simétrica, isto é, dada a Eq. (1), procuramos pelos valores de λ tais que

$$\det\left(M - \lambda \mathbb{I}\right) = 0, \qquad (2)$$

onde $\mathbb{I}$ é a matriz identidade dois por dois, ou seja,

$$\mathbb{I} \equiv \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}. \qquad (3)$$

Das Eqs. (1), (2) e (3) segue que devemos calcular o seguinte determinante para encontrar os autovalores de M :

$$\det \begin{bmatrix} a-\lambda & c \\ d & b-\lambda \end{bmatrix} = 0, \qquad (4)$$

onde os possíveis valores de λ satisfazendo a Eq. (4) são os autovalores procurados. O problema é que, no caso em que a, b, c e d são números não nulos, a equação para λ é obtida da Eq. (4) e dá

$$(a-\lambda)(b-\lambda) - cd = 0, \qquad (5)$$

isto é,

$$\lambda^2 - (a+b)\lambda + (ab - cd) = 0, \qquad (6)$$

que é uma equação quadrática. É claro que sabemos que as soluções possíveis para a Eq. (6) são dadas por

$$\lambda_{\pm} = \frac{1}{2}(a+b) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(a+b)^2 - 4(ab-cd)},$$

ou seja,

$$\lambda_{\pm} \;\; = \;\; \frac{1}{2}\left(a+b\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{a^2+2ab+b^2-4ab+4cd},$$

ou ainda,

$$\lambda_{\pm} \;\; = \;\; \frac{1}{2}\left(a+b\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(a-b\right)^2+4cd}. \qquad (7)$$

Embora a matriz M seja real, com todos seus elementos reais, os autovalores da Eq. (7) podem ser complexos, com partes imaginárias não nulas, bastando, para isso, termos $4cd < -\left(a-b\right)^2$. Não há problema algum nisso, pois tudo vai depender do contexto que envolve a diagonalização da matriz dada. Devemos, portanto, considerar o caso geral, mesmo que os autovalores não sejam reais.

O primeiro caso que vamos considerar é quando $c = 0$ ou $d = 0$. Neste caso, a Eq. (7) dá, simplesmente,

$$\lambda_{\pm} \;\; = \;\; \frac{1}{2}\left(a+b\right) \pm \frac{1}{2}\sqrt{\left(a-b\right)^2},$$

isto é,

$$\lambda_{\pm} \;\; = \;\; \frac{1}{2}\left(a+b\right) \pm \frac{1}{2}\left|a-b\right|, \qquad (8)$$

que não tem graça alguma, pois é trivial. Já poderíamos ter resolvido o problema imediatamente, só olhando a Eq. (5), que, no caso em que $c = 0$ ou $d = 0$, dá

$$\left(a-\lambda\right)\left(b-\lambda\right) \;\; = \;\; 0. \qquad (9)$$

A Eq. (9) exibe as soluções como sendo $\lambda = a$ ou $\lambda = b$, coincidindo com as possíveis respostas escritas na Eq. (8), seja $a > b$, ou $a < b$, ou $a = b$. Lembre-se: se $c = 0$ ou $d = 0$, então as respostas para os autovalores já estão escritas na própria diagonal principal da matriz! Uma vez esclarecida essa situação trivial, a seguir vamos considerar o caso mais geral, em que c e d são ambos não nulos.

Uma matriz simétrica, como vimos na postagem Diagonalizando uma matriz dois por dois simétrica, é diagonalizável de maneira relativamente fácil. Mas, aqui, vamos considerar uma matriz em que c e d podem ser diferentes, embora não nulos. Veja que interessante esta propriedade:

$$\begin{bmatrix} \frac{a}{d} & 1 \\ 1 & \frac{b}{c} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} d & 0 \\ 0 & c \end{bmatrix} \;\; = \;\; \begin{bmatrix} a & c \\ d & b \end{bmatrix} = M. \qquad (10)$$

A matriz

$$N \;\; \equiv \;\; \begin{bmatrix} \frac{a}{d} & 1 \\ 1 & \frac{b}{c} \end{bmatrix} \qquad (11)$$

é simétrica. Note que não há problemas com as divisões por d e por c, pois ambos esses números são, por hipótese, não nulos. Seja

$$D \;\; \equiv \;\; \begin{bmatrix} d & 0 \\ 0 & c \end{bmatrix}, \qquad (12)$$

que é a matriz que, multiplicada por N, da Eq. (11), dá a matriz original, M, da Eq. (1), como vemos na Eq. (10), isto é,

$$ND = M. \qquad (13)$$

Podemos definir a matriz E como sendo a raiz quadrada de D, isto é,

$$E \equiv \begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ 0 & \sqrt{c} \end{bmatrix}, \qquad (14)$$

que você pode verificar multiplicando a matriz E por ela mesma e vendo que o resultado é a matriz D,

$$EE = D. \qquad (15)$$

Você pode estar se perguntando o que fazer quando c ou d for negativo. A resposta para essa pergunta é simples: se $c < 0$, por exemplo, tome

$$\sqrt{c} = \sqrt{-|c|} = i\sqrt{|c|}, \qquad (16)$$

onde i é a identidade imaginária,

$$i \equiv \sqrt{-1}. \qquad (17)$$

É muito fácil inverter a matriz E, da Eq. (14):

$$E^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{d}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{c}} \end{bmatrix}, \qquad (18)$$

como pode ser verificado multiplicando as Eqs. (14) e (18), isto é,

$$E^{-1}E = EE^{-1} = \mathbb{I}, \qquad (19)$$

onde $\mathbb{I}$ é a matriz identidade 2×2 (cf. Eq. (3)). Usando as Eqs. (11) e (14), note agora a seguinte propriedade:

$$ENE = \begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ 0 & \sqrt{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{a}{d} & 1 \\ 1 & \frac{b}{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ 0 & \sqrt{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{d} & 0 \\ 0 & \sqrt{c} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{a}{d}\sqrt{d} & \sqrt{c} \\ \sqrt{d} & \frac{b}{c}\sqrt{c} \end{bmatrix},$$

isto é,

$$ENE = \begin{bmatrix} a & \sqrt{cd} \\ \sqrt{cd} & b \end{bmatrix}, \qquad (20)$$

que é uma matriz simétrica, com os mesmos elementos da diagonal principal da matriz original, M, da Eq. (1). A estratégia agora é encontrar os autovalores e autovetores da matriz ENE, da Eq. (20), e usá-los para diagonalizar a matriz original, M, da Eq. (1). Como podemos fazer isso?

Suponha que U é um autovetor da Eq. (20), com autovalore λ, ou seja,

$$ENEU = \lambda U. \qquad (21)$$

Vamos multiplicar ambos os membros da Eq. (21) por E^{-1} :

$$E^{-1}ENEU = \lambda E^{-1}U,$$

isto é,

$$NEU = \lambda E^{-1}U. \qquad (22)$$

Mas, é evidente que

$$NEU = NE\mathbb{I}U = NEEE^{-1}U = NDE^{-1}U, \qquad (23)$$

onde usamos as Eqs. (15) e (19). Substituindo a Eq. (23) na Eq. (22), dá

$$M\left(E^{-1}U\right) = \lambda\left(E^{-1}U\right), \qquad (24)$$

onde também usamos a Eq. (13). A Eq. (24) prova que, dado um autovetor U, com autovalor λ, da matriz ENE, segue que o correspondente autovetor da matriz original, M, é dado por $E^{-1}U$, com o mesmo autovalor λ da matriz ENE. Veja também que

$$ENE = ENEEE^{-1} = ENDE^{-1} = EME^{-1}, \qquad (25)$$

usando as Eqs. (13), (15) e (19). Qual a vantagem de ter uma matriz simétrica para diagonalizar?

Se U_1 e U_2 são dois autovetores da matriz simétrica, $ENE = EME^{-1}$, com respectivos autovalores λ_1 e λ_2, sendo que $\lambda_1 \neq \lambda_2$, então esses autovetores são ortogonais. Para ver isso, sejam

$$U_1 = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{bmatrix} \qquad (26)$$

e

$$U_2 = \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{bmatrix}. \qquad (27)$$

Das Eqs. (20) e (26), vem

$$ENEU_1 = \begin{bmatrix} a & \sqrt{cd} \\ \sqrt{cd} & b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{bmatrix} = \lambda_1 \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \beta_1 \end{bmatrix}, \qquad (28)$$

isto é,

$$a\alpha_1 + \sqrt{cd}\beta_1 = \lambda_1\alpha_1 \qquad (29)$$

e

$$\sqrt{cd}\alpha_1 + b\beta_1 \quad = \quad \lambda_1\beta_1. \qquad (30)$$

Da Eq. (29) segue que

$$\beta_1 \quad = \quad \frac{\lambda_1 - a}{\sqrt{cd}}\alpha_1. \qquad (31)$$

Procedendo de maneira exatamente análoga, podemos concluir que, para U_2 e λ_2, obtemos

$$\beta_2 \quad = \quad \frac{\lambda_2 - a}{\sqrt{cd}}\alpha_2. \qquad (32)$$

Vamos calcular o produto escalar entre U_1 e U_2 :

$$U_1^t U_2 \quad = \quad \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_2 \\ \beta_2 \end{bmatrix} = \alpha_1\alpha_2 + \beta_1\beta_2, \qquad (33)$$

onde U_1^t é a transposta da matriz coluna U_1, que representa o autovetor com autovalor λ_1. Usando as Eqs. (31) e (32), podemos reescrever a Eq. (33) como

$$U_1^t U_2 \quad = \quad \alpha_1\alpha_2 \left[1 + \frac{(\lambda_1 - a)(\lambda_2 - a)}{cd}\right]. \qquad (34)$$

Como vimos nas Eqs. (21) e (24), os autovalores da matriz ENE são os mesmos da matriz M, que são dados pela Eq. (7). Sejam, portanto,

$$\lambda_1 \quad \equiv \quad \lambda_- \qquad (35)$$

e

$$\lambda_2 \quad \equiv \quad \lambda_+. \qquad (36)$$

Usando as Eqs. (7), (35) e (36) na Eq. (34), dá

$$\begin{aligned} U_1^t U_2 \quad &= \quad \alpha_1\alpha_2 \left\{1 + \frac{\left[(b-a) - \sqrt{(a-b)^2 + 4cd}\right]\left[(b-a) + \sqrt{(a-b)^2 + 4cd}\right]}{4cd}\right\} \\ &= \quad \alpha_1\alpha_2 \left[1 + \frac{(b-a)^2 - (a-b)^2 - 4cd}{4cd}\right] = \alpha_1\alpha_2\left(1 - \frac{4cd}{4cd}\right) = 0, \qquad (37) \end{aligned}$$

mostrando a ortogonalidade desses autovetores. O que ganhamos com isso? Ora, se soubermos um dos autovetores, digamos, U_1, da Eq. (26), o outro é fácil:

$$U_2 \quad = \quad \begin{bmatrix} \beta_1 \\ -\alpha_1 \end{bmatrix}, \qquad (38)$$

que é, obviamente, ortogonal a U_1. Note que autovetores são sempre definidos a menos de uma constante arbitrária multiplicativa, pois, por exemplo,

$$ENE\,(kU_1) \;=\; \lambda_1\,(kU_1)\,, \qquad (39)$$

para qualquer constante $k \neq 0$. Então, basta achar um autovetor, o outro vem de graça! Isso é válido só para matrizes simétricas; você pode verificar que os autovetores da matriz original, M, da Eq. (1), com $c \neq d$, não são ortogonais.

Finalmente, a outra propriedade que ajuda a facilitar a determinação dos autovalores e autovetores de matrizes dois por dois é a que segue. Já reduzimos o problema ao de determinar os autovalores e apenas um autovetor da matriz ENE, da Eq. (20), que é igual à matriz EME^{-1}. Considere, agora, a matriz H, definida por

$$\begin{aligned} H &= EME^{-1} - \frac{a+b}{2}\mathbb{I} \\ &= \begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} & \sqrt{cd} \\ \sqrt{cd} & \frac{\Delta}{2} \end{bmatrix}, \end{aligned} \qquad (40)$$

onde definimos Δ como

$$\Delta \;\equiv\; b - a. \qquad (41)$$

A propriedade que anunciei acima é que os autovetores da Eq. (40) são exatamente os mesmos da Eq. (20). Para ver isso, considere a multiplicação da matriz H a U_1 :

$$HU_1 \;=\; EME^{-1}U_1 - \frac{a+b}{2}U_1 = \left(\lambda_1 - \frac{a+b}{2}\right)U_1, \qquad (42)$$

onde usamos as Eqs. (26), (28) e (40). Obviamente, como você pode verificar, também temos

$$HU_2 \;=\; \left(\lambda_2 - \frac{a+b}{2}\right)U_2, \qquad (43)$$

onde, conforme mencionado logo acima da Eq. (26), U_2 é o autovetor da matriz EME^{-1}, com autovalore λ_2. Encontrar os autovalores da matriz H, definida pela Eq. (40), é bem simples, pois, tudo o que temos a fazer, é encontrar os valores possíveis de ξ, tais que satisfaçam:

$$\det\,(H - \xi\mathbb{I}) \;=\; 0, \qquad (44)$$

que dá

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \xi\right)\left(\frac{\Delta}{2} - \xi\right) - cd \;=\; 0, \qquad (45)$$

ou seja,

$$\xi^2 - \frac{\Delta^2}{4} \;=\; cd, \qquad (46)$$

ou ainda

$$\xi_\pm \;=\; \pm\sqrt{cd+\frac{\Delta^2}{4}}. \qquad (47)$$

Para achar um dos autovetores, por exemplo, fazemos

$$\begin{bmatrix} -\frac{\Delta}{2} & \sqrt{cd} \\ \sqrt{cd} & \frac{\Delta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \;=\; \begin{bmatrix} \xi_- x \\ \xi_- y \end{bmatrix}, \qquad (48)$$

que dá

$$-\frac{\Delta}{2}x+\sqrt{cd}y \;=\; -\sqrt{cd+\frac{\Delta^2}{4}}x, \qquad (49)$$

onde usamos as Eqs. (40) e (47). A Eq. (49) fornece

$$y \;=\; \frac{\frac{\Delta}{2}-\sqrt{cd+\frac{\Delta^2}{4}}}{\sqrt{cd}}x=\frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2\sqrt{cd}}x. \qquad (50)$$

Portanto, um autovetor pode ser escrito como

$$U_- \;=\; \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2\sqrt{cd}} \end{bmatrix}. \qquad (51)$$

Como U_+ deve ser ortogonal a U_-, segue que

$$U_+ \;=\; \begin{bmatrix} \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2\sqrt{cd}} \\ -1 \end{bmatrix}. \qquad (52)$$

Para achar os autovetores da matriz M, basta multiplicar as Eqs. (50) e (51) por E^{-1}, conforme vimos na Eq. (24). Então, das Eqs. (18), (51) e (52), vem

$$E^{-1}U_- \;=\; \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{d}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{c}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2\sqrt{cd}} \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{d}} \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2c} \end{bmatrix} \qquad (53)$$

e

$$E^{-1}U_+ \;=\; \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{d}} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{c}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2\sqrt{cd}} \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{c}} \begin{bmatrix} \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2d} \\ -1 \end{bmatrix}. \qquad (54)$$

Como autovetores são definidos a menos de uma constante multiplicativa, segue que podemos definir os autovetores V_1 e V_2, da matriz M através das Eqs. (53) e (54), fazendo:

$$V_1 \;\equiv\; \sqrt{d}E^{-1}U_- = \begin{bmatrix} 1 \\ \frac{\Delta-\sqrt{\Delta^2+4cd}}{2c} \end{bmatrix} \qquad (55)$$

e

$$V_2 \equiv \sqrt{c}E^{-1}U_+ = \begin{bmatrix} \frac{\Delta - \sqrt{\Delta^2+4cd}}{2d} \\ -1 \end{bmatrix}, \qquad (56)$$

com autovalores, respectivos, dados pelas Eqs. (42), (43) e (47), isto é,

$$\left(\lambda_1 - \frac{a+b}{2}\right) = -\sqrt{cd + \frac{\Delta^2}{4}}, \qquad (57)$$

que dá

$$\lambda_1 = \frac{a+b}{2} - \sqrt{cd + \frac{\Delta^2}{4}} \qquad (58)$$

e

$$\left(\lambda_2 - \frac{a+b}{2}\right) = \sqrt{cd + \frac{\Delta^2}{4}}, \qquad (59)$$

ou seja,

$$\lambda_2 = \frac{a+b}{2} + \sqrt{cd + \frac{\Delta^2}{4}}. \qquad (60)$$

Você pode facilmente verificar, usando a Eq. (41), que as Eqs. (58) e (60) são exatamente os autovalores de M já calculados na Eq. (7).

Em suma, fica muito fácil resolver o problema de diagonalização da matriz M, geral, da Eq. (1). Basta tomar a matriz E, dada pela Eq. (14), calcular a matriz $H = EME^{-1} - \mathbb{I}\,(a+b)/2$, da Eq. (40), e diagonalizá-la. Os autovalores da matriz M serão os da matriz H, acrescidos de $(a+b)/2$, enquanto que os autovetores de M podem ser obtidos a partir dos de H, multiplicando-os por E^{-1}, da Eq. (18). Não se esqueça que, como H é simétrica, basta encontrar um dos seus autovetores, pois o outro será seu ortogonal, a menos de uma constante multiplicativa, como nas Eqs. (51) e (52).