

Μηχανική II

Αρχή των Rayleigh-Ritz

Έστω δύο ερμιτιανοί πίνακες¹ $\mathbf{A}$ και $\mathbf{B}$. Σχηματίζουμε το πηλίκο

$$\rho(x) = \frac{x_i^* A_{ij} x_j}{x_i^* B_{ij} x_j}.$$

(Το διάνυσμα x μπορεί να έχει μιγαδικά στοιχεία.) Το πηλίκο αυτό λέγεται πηλίκο Rayleigh. Εάν συμβολίσουμε με x^+ το συζυγές ανάστροφο διάνυσμα, το πηλίκο $\rho(x)$ γράφεται ισοδυνάμως:

$$\rho(x) = \frac{x^+ \mathbf{A} x}{x^+ \mathbf{B} x} \equiv \frac{(x, \mathbf{A} x)}{(x, \mathbf{B} x)},$$

όπου εδώ το εσωτερικό γινόμενο² δύο διανυσμάτων ορίζεται ως $(x, y) \equiv x_i^* y_i \equiv x^+ y$. Η γραφή του πηλίκου με χρήση εσωτερικών γινομένων είναι ιδιαίτερως χρήσιμη διότι τα συμπεράσματα που θα εξαχθούν γενικεύονται αμέσως σε όλους τους γραμμικούς χώρους στους οποίους ορίζεται κάποιο εσωτερικό γινόμενο³.

¹ Ο συζυγής και ανάστροφος ενός πίνακα $\mathbf{A}$ λέγεται ερμιτιανός ανάστροφος (hermitian transpose) και συμβολίζεται με $\mathbf{A}^+$. Ορίζουμε δηλαδή τον $\mathbf{A}^+$ ως $A_{ij}^+ = A_{ji}^*$, όπου το $*$ δηλώνει το μιγαδικό συζυγές στοιχείο. Ερμιτιανός (hermitian) πίνακας είναι αυτός που ισούται με τον ερμιτιανό ανάστρόφό του: $\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$. Όσον αφορά πίνακες με πραγματικά μόνο στοιχεία, ερμιτιανοί είναι οι συμμετρικοί πίνακες.

² Το εσωτερικό γινόμενο δύο διανυσμάτων (x, y) είναι ένας πραγματικός αριθμός. Το εσωτερικό γινόμενο ως πράξη μεταξύ δύο διανυσμάτων έχει τις εξής ιδιότητες α) Είναι γραμμικό: $\forall \alpha, \beta$ πραγματικούς ισχύει: $(x, \alpha y + \beta z) = \alpha(x, y) + \beta(x, z)$, β) είναι ερμιτιανό: $(x, y) = (y, x)^*$, όπου $*$ συμβολίζει το μιγαδικό συζυγές, και γ) είναι θετικό: $(x, x) = 0$ μόνο και μόνο όταν $x = 0$, αλλιώς $(x, x) > 0$. Άσκηση: Αποδείξτε βασισμένοι στις παραπάνω ιδιότητες του εσωτερικού γινομένου ότι αν $(x, y) = 0 \forall y$ τότε αναγκαστικά $x = 0$. Δηλαδή ένα διάνυσμα που είναι κάθετο σε όλα τα διανύσματα του χώρου είναι αναγκαστικά μηδενικό. [Σημείωση: το εσωτερικό γινόμενο μεταξύ δύο τετρανυσμάτων στη σχετικότητα μπορεί να είναι και αρνητικό. Αυτό αποτελεί μια επέκταση του ορισμού των εσωτερικών γινομένων σε χώρους με μη θετικά ορισμένη μετρική και προφανώς γι' αυτά δεν ισχύει η (γ) ιδιότητα.]

³ Π.χ. στους χώρους ολοκληρώσιμων συναρτήσεων f , ορισμένων σε κάποιο έστω κλειστό διάστημα $[a, b]$ με το εσωτερικό γινόμενο $(f, g) = \int_a^b f^*(x)g(x)dx$. Τότε ο γραμμικός τελεστής $\mathbf{A}$ (δηλαδή για τον οποίο ισχύει $\mathbf{A}(\lambda f + \mu g) = \lambda \mathbf{A}f + \mu \mathbf{A}g$) λέγεται ερμιτιανός όταν $\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$, όπου $\mathbf{A}^+$ ο ερμιτιανός συζυγής τελεστής που

Παρατηρούμε ότι επειδή οι πίνακες $\mathbf{A}$ και $\mathbf{B}$ είναι ερμιτιανοί το πηλίκο $\rho(x)$ λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές (αποδείξτε ότι $[\rho(x)]^* = \rho(x)$). Θέλουμε να βρούμε και να χαρακτηρίσουμε τα διανύσματα x που καθιστούν το πηλίκο Rayleigh ακρότατο.

Θα αποδείξουμε ότι το πηλίκο Rayleigh καθίσταται ακρότατο για τα διανύσματα x που είναι ιδιοανύσματα του πίνακα $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ δηλαδή για τα x που ικανοποιούν τη σχέση: $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}x = \lambda x$, ή γενικότερα, όταν το x είναι γενικευμένο ιδιοάνυσμα και των δύο πινάκων $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ δηλαδή όταν $\mathbf{A}x = \lambda\mathbf{B}x$. Το λ που αντιστοιχεί στο ιδιοάνυσμα x ισούται με την ακρότατη τιμή του πηλίκου $\rho(x)$. Επειδή όμως το πηλίκο Rayleigh λαμβάνει μόνο πραγματικές τιμές οι ιδιοτιμές λ είναι πραγματικές και μπορούν να διαταχθούν ως $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$ (υποθέτουμε ότι όλες οι ιδιοτιμές είναι διαφορετικές). Συνεπώς το πηλίκο Rayleigh καθίσταται μέγιστο για το ιδιοδιάνυσμα x_n που αντιστοιχεί στη μέγιστη ιδιοτιμή λ_n .

Απόδειξη: Θα ακολουθήσουμε ανάλογη απόδειξη με αυτήν του λογισμού των μεταβολών. Έστω ότι το x καθιστά το πηλίκο Rayleigh ακρότατο. Τότε για κάθε διάνυσμα y θα ισχύει $\rho(x + \varepsilon y) = \rho(x) + O(\varepsilon^2)$, για $\varepsilon \ll 1$, και συνεπώς όταν το x

είναι ακρότατο πρέπει $\left. \frac{d\rho(x + \varepsilon y)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 0$. Επειδή

$$\rho(x + \varepsilon y) = \frac{(x, \mathbf{A}x) + \varepsilon[(x, \mathbf{A}y) + (y, \mathbf{A}x)] + \varepsilon^2(y, \mathbf{A}y)}{(x, \mathbf{B}x) + \varepsilon[(x, \mathbf{B}y) + (y, \mathbf{B}x)] + \varepsilon^2(y, \mathbf{B}y)},$$

έχουμε:

$$\left. \frac{d\rho(x + \varepsilon y)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \frac{(x, \mathbf{A}y) + (y, \mathbf{A}x)}{(x, \mathbf{B}x)} - \frac{(x, \mathbf{A}x)}{(x, \mathbf{B}x)^2} [(x, \mathbf{B}y) + (y, \mathbf{B}x)] =$$

$$= \frac{1}{(x, \mathbf{B}x)} \left\{ (x, [\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]y) + (y, [\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]x) \right\}.$$

Τώρα θα χρησιμοποιήσουμε το γεγονός ότι ο $\mathbf{A}$ και ο $\mathbf{B}$ είναι ερμιτιανοί και ότι το $\rho(x)$ είναι πραγματικό για να γράψουμε:

$$(x, [\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]y) + (y, [\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]x) = ([\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]x, y) + (y, [\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]x).$$

Για να είναι το x ακρότατο θα πρέπει για κάθε διάνυσμα y το x να ικανοποιεί τη σχέση $[\mathbf{A} - \rho(x)\mathbf{B}]x = 0$, δηλαδή το x να είναι γενικευμένο ιδιοάνυσμα των $\mathbf{A}$ και $\mathbf{B}$, ή ιδιοάνυσμα του $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$ και τότε το πηλίκο Rayleigh είναι η αντίστοιχη ιδιοτιμή. Συνεπώς οι τιμές του πηλίκου Rayleigh κείνται μεταξύ της μέγιστης και ελάχιστης ιδιοτιμής του $\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}$, δηλαδή: $\lambda_1 \leq \rho(x) \leq \lambda_n$.

Η ιδιότητα αυτή του πηλίκου Rayleigh, η οποία ονομάζεται και αρχή Rayleigh-Ritz, έχει πολλές εφαρμογές στον προσεγγιστικό προσδιορισμό των ιδιοσυχνοτήτων σύνθετων φυσικών συστημάτων όπως λ.χ. ο προσδιορισμός των συχνοτήτων φυσικών ταλαντώσεων του Ήλιου ή της Γης. Σύμφωνα με την παραπάνω ιδιότητα εάν κάνουμε λάθος τάξεως $O(\varepsilon)$ στην ιδιοσυνάρτηση το λάθος στην ιδιοσυχνότητα είναι τάξεως

ορίζεται από τη σχέση $(f, \mathbf{A}g) \equiv (\mathbf{A}^+ f, g)$. Άσκηση: Αποδείξτε ότι ο ερμιτιανός συζυγής ενός γραμμικού μετασχηματισμού που προσδιορίζεται από τον πίνακα $\mathbf{A}$ είναι, ως προς το κλασσικό ευκλείδειο εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων, ο ερμιτιανός ανάστροφος του $\mathbf{A}$.

$O(\varepsilon^2)$! Με τον τρόπο αυτό μπορούμε να προσεγγίσουμε πολύ καλά τις ιδιοσυχνότητες του συστήματος εάν μπορούμε να προτείνουμε βασισμένοι στη διαίσθηση μας κάποια υποψήφια ιδιοσυνάρτηση. Εξάλλου ακόμη και αν δεν μπορούμε με κανένα τρόπο να προβλέψουμε τη δομή των ιδιοσυναρτήσεων μερικοί υπολογισμοί του πηλίκου Rayleigh με τυχαία διανύσματα x αμέσως μας καταδεικνύουν ότι η μέγιστη ιδιοσυχνότητα του συστήματος πρέπει να είναι μεγαλύτερη από τη μέγιστη τιμή των πηλίκων Rayleigh και η ελάχιστη ιδιοσυχνότητα πρέπει να είναι μικρότερη από όλες τις τιμές των πηλίκων Rayleigh. Αν είχαμε δε υπομονή, και προβαίναμε σε πολλούς υπολογισμούς, τότε θα βλέπαμε, σύμφωνα με το παραπάνω θεώρημα, ότι οι τιμές του πηλίκου που θα υπολογίζαμε, για τυχαία διανύσματα, συσσωρεύονται γύρω από κάποιες συγκεκριμένες τιμές, οι οποίες δεν είναι τίποτε άλλο από τις ιδιοσυχνότητες του συστήματος. Μπορεί να μη σας ικανοποιεί το γεγονός ότι πολλές φορές πρέπει να προβούμε σε προσεγγιστικές μεθόδους τέτοιας μορφής, αλλά αυτό είναι αναγκαίο όταν αντιμετωπίζουμε σύνθετα και δυσεπίλυτα φυσικά συστήματα.