

Capítulo 4

Diagonalización de matrices

El problema de diagonalización de matrices consiste en, dada una matriz cuadrada A , de dimension $n \times n$, encontrar una aplicación lineal S que reduzca A a la forma diagonal mediante la transformación similar $S^{-1}AS$, es decir

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

donde Λ es una matriz diagonal. El algebra elemental da la siguiente prescripción para encontrar dicha transformación lineal:

1. Resolver la ecuación característica dada por la anulación del determinante de $A - \lambda I$:

$$|A - \lambda I| = 0$$

donde I es la matriz identidad y λ una variable. Si la matriz A es diagonalizable, dicha ecuación característica toma la forma

$$c_0 + c_1\lambda + \dots + c_n\lambda^n = 0$$

y tiene n soluciones, no necesariamente distintas.

2. Construir la matriz de la aplicación lineal S tomando como columnas los vectores propios v_k correspondientes a los valores propios λ_k , normalizados a la unidad, obtenidos como solución de los n sistemas de ecuaciones (indeterminadas)

$$Av_k = \lambda_k v_k$$

o lo que es lo mismo

$$(A - \lambda_k I)v_k = 0$$

En el caso de raíces múltiples, se toma una base ortogonal del subespacio propio definido por el valor propio múltiple, que se obtiene mediante el método de ortogonalización de Schmidt. Si un valor propio λ_j tiene multiplicidad n_j , el subespacio propio correspondiente tiene dimensión n_j .

3. La matriz diagonal Λ tiene como elementos de la diagonal los valores propios λ_k . Cada valor propio aparece repetido un número de veces igual a su multiplicidad.

Los algoritmos numéricos basados en esta receta no son eficientes. De hecho, el primer paso, consistente en calcular las raíces de la ecuación característica (por cualquiera de los métodos

estudiados en el capítulo 2 o similares), es mucho más lento que los métodos más eficientes de diagonalización numérica, hasta el punto de que uno de los métodos más eficientes de encontrar raíces de polinomios es buscar una matriz cuya ecuación característica sea el polinomio cuyas raíces se desea calcular, y diagonalizar dicha matriz por métodos numéricos de diagonalización eficientes.

Los métodos de diagonalización de una matriz arbitraria son relativamente complejos. Uno de los casos más frecuentes es el de matrices simétricas. En este caso, existen métodos mucho más sencillos que el método general. El método más eficiente es reducir la matriz a la forma tridiagonal mediante el método de Hoserholder y reducir esta matriz a la forma diagonal mediante el método QR. Este es el método que se utiliza en la librería TNT empleada en las prácticas. Vamos a ver a continuación el método de Jacobi. Aunque este método no es interesante como algoritmo numérico para grandes matrices, es particularmente intuitivo y pedagógico, y utiliza el concepto de eliminación sucesiva de elementos que utilizan también los métodos más eficientes. Para matrices pequeñas y medias, realiza la diagonalización en unas pocas iteraciones y es un método robusto.

4.1. Método de Jacobi

Este es un método de diagonalización de matrices simétricas especialmente diseñado para realizar los cálculos manualmente o con calculadora, aunque cuando se programa en un ordenador es un método robusto y relativamente eficiente. La idea del método de Jacobi es realizar rotaciones, de forma que se anule el elemento más grande fuera de la diagonal. Una rotación es una transformación similar mediante una matriz ortogonal. Como la inversa y la transpuesta de una matriz ortogonal coinciden, cada paso del método de Jacobi consiste en realizar la transformación

$$A_n = O_n^T A_{n-1} O_n$$

donde O_n es la matriz de rotación del paso n -ésimo y A_{n-1} es el resultado de las $n - 1$ rotaciones precedentes. Para fijar ideas, antes de estudiar el caso general vamos a ver el efecto de una rotación en los ejes x e y sobre una matriz de tres dimensiones. Podemos escribir la matriz de rotación como

$$O = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

y el resultado de la rotación es

$$\begin{aligned}
 O^T A O &= \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12} & a_{22} & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \cos \theta - a_{12} \sin \theta & a_{12} \cos \theta + a_{11} \sin \theta & a_{13} \\ a_{12} \cos \theta - a_{22} \sin \theta & a_{22} \cos \theta - a_{12} \sin \theta & a_{23} \\ a_{13} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} = \\
 &= \begin{bmatrix} a_{11} \cos^2 \theta + a_{22} \sin^2 \theta - 2a_{12} \sin \theta \cos \theta & a_{12}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (a_{11} - a_{22}) \sin \theta \cos \theta & a_{13} \cos \theta - a_{23} \sin \theta \\ a_{12}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (a_{11} - a_{22}) \sin \theta \cos \theta & a_{22} \cos^2 \theta + a_{11} \sin^2 \theta + 2a_{12} \sin \theta \cos \theta & a_{23} \cos \theta + a_{13} \sin \theta \\ a_{13} \cos \theta - a_{23} \sin \theta & a_{23} \cos \theta + a_{13} \sin \theta & a_{33} \end{bmatrix} \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Si deseamos que se anule el elemento a'_{12} debemos de elegir el ángulo de rotación θ que cumple

$$a_{12}(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (a_{11} - a_{22}) \sin \theta \cos \theta = 0$$

que da

$$\frac{\sin \theta \cos \theta}{(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)} = \frac{a_{12}}{a_{22} - a_{11}} \quad (4.2)$$

Podemos expresar esta igualdad en función del ángulo doble como

$$\alpha = \cot 2\theta = \frac{a_{22} - a_{11}}{2a_{12}} \quad (4.3)$$

Vemos que no es necesario invocar funciones trigonométricas para calcular $\cot 2\theta$. A fin de economizar tiempo de cálculo también es conveniente calcular $\sin \theta$ y $\cos \theta$ sin invocar funciones trigonométricas. Denominando α al valor de $\cot 2\theta$ dado por la ecuación 4.3, y teniendo en cuenta que

$$\cot 2\theta = \frac{(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta)}{2 \sin \theta \cos \theta} = \frac{1 - \tan^2 \theta}{2 \tan \theta}$$

podemos escribir la siguiente ecuación de segundo orden para $\tan \theta$

$$\tan^2 \theta + 2\alpha \tan \theta - 1 = 0$$

cuyas soluciones son

$$\tan \theta = -\alpha \pm \sqrt{\alpha^2 + 1}$$

La experiencia indica que el método converge más rápido si siempre se coge la rotación de menos de 45° , que corresponde a la raíz más pequeña. Dicha raíz más pequeña se puede escribir en función del signo de α como

$$\tan \theta = -\alpha + \text{sig}(\alpha) \sqrt{\alpha^2 + 1} \quad (4.4)$$

Los valores de $\sin \theta$ y $\cos \theta$ los podemos determinar a partir de $\tan \theta$ mediante fórmulas que no precisan el uso de funciones trigonométricas.

Pasemos ahora a considerar el método de Jacobi en el caso general. En cada etapa buscamos el elemento mayor en valor absoluto fuera de la diagonal, que tomamos como a_{pq} . Realizamos una rotación que anule dicho elemento. La matriz de rotación correspondiente tendrá 1 en la diagonal y 0 fuera de la diagonal salvo en los elementos O_{pp}, O_{qq}, O_{pq} y O_{qp} . La podemos escribir como como

$$O = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & O_{pp} & \cdots & O_{pq} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & O_{qp} & \cdots & O_{qq} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cos \theta & \cdots & \sin \theta & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & -\sin \theta & \cdots & \cos \theta & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

donde, definiendo

$$\alpha = \frac{a_{qq} - a_{pp}}{2a_{pq}} \quad (4.6)$$

la anulción de a'_{pq} nos proporciona las siguientes relaciones para $\sin \theta$, $\cos \theta$ y $\tan \theta$

$$\begin{aligned} \tan \theta &= -\alpha + \text{sig}(\alpha) \sqrt{\alpha^2 + 1} \\ \cos \theta &= \frac{1}{\sqrt{\tan^2 \theta + 1}} \\ \sin \theta &= \tan \theta \cos \theta \end{aligned} \quad (4.7)$$

Mediante esta rotación, denominando $s = \sin \theta$, $c = \cos \theta$ y $t = \tan \theta$, y teniendo en cuenta la ecuación 4.1, los elementos de la matriz A se transforman como

$$\begin{aligned} a'_{pp} &= c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sca_{pq} \\ a'_{qq} &= ca_{qq} + s^2 a_{pp} + 2sca_{pq} \\ a'_{pq} &= (c^2 - s^2)a_{pq} + sc(a_{pp} - a_{qq}) \\ a'_{rp} &= ca_{rp} - sa_{rq} \\ a'_{rq} &= ca_{rq} + sa_{rp} \end{aligned} \quad (4.8)$$

donde r indica todos los índices distintos de p y q . Todos los demás elementos quedan inalterados. Estas relaciones se pueden escribir de forma aún más compacta, teniendo en cuenta la anulción de a'_{pq} , como:

$$\begin{aligned} a'_{pp} &= a_{pp} - ta_{pq} \\ a'_{qq} &= a_{qq} + ta_{pq} \\ a'_{rp} &= a_{rp} - s(a_{rq} + \tau a_{rp}) \\ a'_{rq} &= a_{rq} + s(a_{rp} - \tau a_{rq}) \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde

$$\tau = \tan \frac{\theta}{2} = \frac{s}{1+c} \quad (4.10)$$

Esta es la relación que debe de utilizarse en la programación del algoritmo para actualizar A en cada iteración, ya que por un lado ahorra algunas operaciones y por otro expresa el elemento actualizado como el elemento inicial más un valor de actualización, evitando cancelaciones de términos similares (underflows).

La demostración de estas últimas relaciones es como sigue: de las relaciones trigonométricas del ángulo doble y de la anulación de a'_{pq} obtenemos

$$\begin{aligned} \tan \frac{\theta}{2} &= \frac{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} = \frac{2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} - \cos^2 \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} = \frac{1-c}{s} = \frac{1-c^2}{s(1+c)} = \frac{s}{1+c} \\ a_{pp} - a_{qq} &= \frac{c^2 - s^2}{sc} a_{pq} \end{aligned}$$

con lo que las ecuaciones 4.8 de actualización de A quedan como:

$$\begin{aligned} a'_{rp} &= ca_{rp} - sa_{rq} = a_{rp} + (c-1)a_{rp} - sa_{rq} = a_{rp} - s(a_{rq} + \frac{1-c}{s}a_{rp}) = a_{rp} - s(a_{rq} + \tau a_{rp}) \\ a'_{rq} &= ca_{rq} + sa_{rp} = a_{rq} + (c-1)a_{rq} + sa_{rp} = a_{rq} + s(\frac{c-1}{s}a_{rq} + a_{rp}) = a_{rq} + s(a_{rp} - \tau a_{rq}) \\ a'_{pp} &= a_{pp} + (c^2 - 1)a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sca_{pq} = a_{pp} - s^2(a_{pp} - a_{qq}) - 2sca_{pq} = \\ &= a_{pp} + s^2 \frac{c^2 - s^2}{sc} a_{pq} - 2sca_{pq} = a_{pp} - ta_{pq} \\ a'_{qq} &= a_{qq} + s^2 a_{pp} + (c^2 - 1)a_{qq} + 2sca_{pq} = a_{qq} + s^2 \frac{c^2 - s^2}{sc} a_{pq} + 2sca_{pq} = a_{qq} + ta_{pq} \end{aligned}$$

Si $a_{pp} = a_{qq}$, entonces α es nulo. En este caso se toma $\theta = 45^\circ$ y $t = 1$. Si el método converge en m iteraciones, los vectores propios serán las columnas la matriz V obtenida como producto de las m transformaciones realizadas:

$$V = O_1 O_2 \cdots O_m$$

La matriz V se puede actualizar en cada iteración mediante $V' = VO$ que da las relaciones:

$$\begin{aligned} v'_{rs} &= v_{rs} \quad r \neq p, s \neq q \\ v'_{pr} &= cv_{pr} + sv_{qr} \\ v'_{qr} &= -sv_{pr} + cv_{qr} \end{aligned} \quad (4.11)$$

que se obtienen de la forma de O dada por la ecuación 4.5.

Notemos que en cada iteración anulamos un elemento a_{pq} , pero que este elemento vuelve a reaparecer, aunque con menos intensidad, en la siguiente rotación. En este sentido, el método

de Jacobi es un método infinito, es decir hacen falta infinitas iteraciones para llegar a la matriz diagonalizada exacta. Esto coloca al método de Jacobi en desventaja, por lo menos teórica, con los métodos de Givens y Householder, que obtienen la matriz diagonal en un número finito de iteraciones. Sin embargo, el método de Jacobi es robusto, de indudable valor pedagógico, y para pequeñas matrices el tiempo de cálculo es como mucho el doble del necesario por los métodos mencionados.

El método tal y como lo acabamos de exponer es conveniente para el cálculo manual o con calculadora, pero en la práctica, en el caso de matrices de grandes dimensiones, la búsqueda del elemento de mayor valor absoluto fuera de la diagonal es muy costosa en tiempo de cálculo, tanto o más que los cálculos de la iteración en sí,¹ por lo que es más conveniente anular los elementos fuera de la diagonal mediante ciclos sistemáticos o barridos. El método de Jacobi converge, en el sentido que dado un ε arbitrariamente pequeño, después de un número de rotaciones suficientemente elevado se cumple

$$\Delta = \sum_{r < s} a_{rs}^2 < \varepsilon \quad (4.12)$$

De hecho, de las ecuaciones 4.8 se obtiene fácilmente que para $r \neq p, q$ se cumple $a_{rq}^2 + a_{rp}^2 = a_{rq}^2 + a_{rp}^2$, con lo que la única disminución de Δ es debida a la anulación de a_{pq} , por lo que el efecto de una rotación sobre Δ es

$$\Delta' = \Delta - a_{pq}^2 \quad (4.13)$$

Como podemos anular el a_{pq} que deseamos, es obvio que el método es convergente. Cuando se programa el algoritmo, se fija la tolerancia ε que es el valor de Δ para el que se paran las iteraciones. Cuando se aplica el método de Jacobi por ciclos, después de algunos ciclos hay elementos que se hacen muy pequeños. Es conveniente definir un umbral δ , de forma que si un elemento cumple $a_{pq}^2 < \delta$ entonces se salta la rotación para dicho elemento. Se puede fijar δ como por ejemplo la mitad del valor promedio de a_{pq}^2 cuando se alcanza la tolerancia ε :

$$\delta = \frac{1}{2} \frac{2\varepsilon}{n(n-1)} \simeq \frac{\varepsilon}{n^2}$$

Resumen: La manera más adecuada de programar el método de diagonalización de Jacobi es realizar ciclos de iteraciones, anulando por ejemplo a_{12} al comienzo del ciclo y a_{n-1n} al final del mismo. En cada iteración se calcula α y de aquí t , c y s mediante las ecuaciones ?? y seguidamente τ mediante la ecuación 4.10. A continuación se procede a la actualización de A y de los

¹Determinar el elemento de mayor valor absoluto fuera de la diagonal implica comparar $N = \frac{n(n-1)}{2}$ elementos (la matriz tiene n^2 elementos y n en la diagonal y además es simétrica), lo que implica $\frac{N(N-1)}{2} = \frac{(n+1)n(n-1)(n-2)}{8}$ comparaciones, mientras que actualizar la matriz después de una iteración implica actualizar $2n-2$ elementos. Sea t_{compar} el tiempo de CPU requerido para comparar dos elementos y t_{actual} el tiempo promedio necesario para actualizar un elemento. Si n es suficientemente grande para que se cumpla $(n+1)n(n-1)(n-2)t_{compar} > 16(n-1)t_{actual}$, entonces la determinación del mayor elemento cuesta más tiempo que el resto de la iteración. Cuando n es enorme, $(n+1)n(n-2)t_{compar} \simeq n^3 t_{compar}$ puede ser muchas veces mayor que $16t_{actual}$, y en este caso la realización de barridos es ampliamente ventajoso.

vectores propios mediante las ecuaciones 4.9 y 4.11. Finalmente, se verifica si se ha alcanzado la convergencia deseada calculando el valor de Δ dado por 4.12 (mediante la ecuación 4.13) y comparándolo con la tolerancia especificada ϵ .

Ejemplo: Sea A dada por

$$A = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Realizar una iteración del método de Jacobi.

Anulamos a_{12} lo que da $\alpha = 0$. Tomamos por lo tanto $t = 1$, $\theta = \frac{\pi}{4}$, lo que da $s = c = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y $\tau = \frac{s}{1+c} = \frac{1}{1+\sqrt{2}}$ y actualizamos A y V :

$$a'_{11} = a_{11} - ta_{12} = 2 + 1 = 3$$

$$a'_{12} = 0$$

$$a'_{22} = a_{22} + ta_{12} = 2 - 1 = 1$$

$$a'_{13} = a_{13} - s(a_{23} + \tau a_{13}) = 0 - \frac{1}{\sqrt{2}}(-1 + \frac{1}{1+\sqrt{2}}0) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$a'_{23} = a_{23} + s(a_{13} - \tau a_{23}) = -1 + \frac{1}{\sqrt{2}}(0 + \frac{1}{1+\sqrt{2}}) = -\frac{1+\sqrt{2}}{2+\sqrt{2}}$$

$$v'_{13} = v'_{23} = v'_{31} = v'_{32} = 0; \quad v'_{33} = 1;$$

$$v'_{11} = cv_{11} - sv_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad v'_{12} = sv_{11} + cv_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$v'_{21} = cv_{21} - sv_{22} = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad v'_{22} = sv_{21} + cv_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Observamos que $\Delta = a_{12}^2 + a_{13}^2 + a_{23}^2$ ha pasado de $\Delta = 2$ para la matriz inicial a

$$\Delta' = \frac{1}{2} + \frac{3+2\sqrt{2}}{6+4\sqrt{2}} = 1 = \Delta - a_{12}^2$$

después de la primera iteración. En la segunda iteración anulamos a_{13} y procedemos análogamente.

4.2. Matrices hermíticas

Una matriz H es hermítica si es igual a la matriz compleja conjugada de su transpuesta denotada por H^\dagger

$$H = H^\dagger$$

Las matrices hermíticas son las análogas de las simétricas en el campo complejo, en el sentido de que todos sus valores propios son reales. El método de Jacobi se puede aplicar a matrices

hermíticas. En vez de una rotación se realiza una transformación unitaria que se puede expresar convenientemente de la forma

$$U = \begin{bmatrix} \cos \theta \exp(i\phi) & \sin \theta \exp(i\phi) & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

que actuando sobre A da:

$$\begin{aligned} U^\dagger A U &= \begin{bmatrix} \cos \theta \exp(-i\phi) & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta \exp(-i\phi) & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{12}^* & a_{22} & a_{23} \\ a_{13}^* & a_{23}^* & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \theta \exp(i\phi) & \sin \theta \exp(2i\phi) & 0 \\ -\sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \cos \theta \exp(-i\phi) & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta \exp(-i\phi) & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} \cos \theta \exp(i\phi) - a_{12} \sin \theta & a_{12} \cos \theta + a_{11} \sin \theta \exp(i\phi) & a_{13} \\ a_{12}^* \cos \theta \exp(i\phi) - a_{22} \sin \theta & a_{22} \cos \theta + a_{12}^* \sin \theta \exp(i\phi) & a_{23} \\ a_{13}^* \cos \theta \exp(i\phi) - a_{23}^* \sin \theta & a_{13}^* \sin \theta \exp(i\phi) + a_{23}^* \cos \theta & a_{33} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} a_{11} c^2 + a_{22} s^2 - 2cs \operatorname{Re}[a_{12} \exp(-i\phi)] & a_{12} c^2 \exp(-i\phi) - a_{12}^* s^2 \exp(i\phi) + (a_{11} - a_{22}) cs & a_{13} c \exp(-i\phi) - a_{23} s \\ a_{12}^* c^2 \exp(i\phi) - a_{12} s^2 \exp(-i\phi) + (a_{11} - a_{22}) cs & a_{22} c^2 + a_{11} s^2 + 2cs \operatorname{Re}[a_{12} \exp(-i\phi)] & a_{23} c + a_{13} s \exp(-i\phi) \\ a_{13}^* c \exp(i\phi) - a_{23}^* s & a_{23}^* c + a_{13}^* s \exp(i\phi) & a_{33} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

donde en la última matriz hemos remplazado $s = \sin \theta$ y $c = \cos \theta$.

La condición de anulación de a'_{12} es

$$a_{12} \cos^2 \theta \exp(-i\phi) - a_{12}^* \sin^2 \theta \exp(-i\phi) + (a_{11} - a_{22}) \sin \theta \cos \theta = 0$$

que, separando partes real e imaginaria, queda como

$$(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \operatorname{Re}[a_{12} \exp(-i\phi)] + (a_{11} - a_{22}) \sin \theta \cos \theta = 0$$

$$(\cos^2 \theta + \sin^2 \theta) \operatorname{Im}[a_{12} \exp(-i\phi)] = 0$$

De la expresión

$$a_{12} \exp(-i\phi) = (a_{12}^R + ia_{12}^I)(\cos \phi - i \sin \phi) = a_{12}^R \cos \phi + a_{12}^I \sin \phi + i(a_{12}^I \cos \phi - a_{12}^R \sin \phi)$$

obtenemos que las condiciones que deben cumplir los ángulos θ y ϕ son:

$$\tan \phi = \alpha_\phi = \frac{a_{12}^I}{a_{12}^R}$$

$$\tan 2\theta = \alpha = \frac{2(a_{12}^R \cos \phi + a_{12}^I \sin \phi)}{a_{22} - a_{11}}$$

De estas expresiones se procede análogamente al caso real al cálculo de $t, s, c, \exp(i\phi)$ mediante operaciones puramente algebraicas y seguidamente la actualización de la matriz A . Tenemos

$$z \equiv \exp(-i\phi) = (\cos \phi - i \sin \phi) = \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha_\phi^2}} - i \frac{\alpha_\phi}{\sqrt{1 + \alpha_\phi^2}}$$

$$t = -\alpha + \operatorname{sig}(\alpha)\sqrt{\alpha+1}, \quad c = \frac{1}{\sqrt{t^2+1}}, \quad s = tc$$

$$\begin{aligned} a'_{pp} &= c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} - 2sc \operatorname{Re}[za_{pq}] \\ a'_{qq} &= c^2 a_{pp} + s^2 a_{qq} + 2sc \operatorname{Re}[za_{pq}] \\ a'_{pq} &= 0 \\ a'_{pr} &= cza_{pr} - sa_{qr} \quad r \neq p, q \\ a'_{qr} &= ca_{qr} + sza_{pr} \end{aligned}$$

que se pueden escribir de la forma mas compacta

$$\begin{aligned} a'_{pp} &= a_{pp} - t \operatorname{Re}[za_{pq}] \\ a'_{qq} &= a_{qq} + t \operatorname{Re}[za_{pq}] \\ a'_{pr} &= za_{pr} - s(a_{qr} + \tau za_{pr}) \\ a'_{qr} &= za_{qr} + s(a_{pr} - \tau za_{qr}) \end{aligned}$$

con $\tau = \tan \frac{\theta}{2}$.

Al igual que en caso real se cumple

$$a'^2_{pr} + a'^2_{qr} = a^2_{pr} + a^2_{qr}$$

En el caso de matrices de pequeña dimensión se elimina el elemento de fuera de la diagonal de mayor módulo. Para grandes dimensiones se realiza una eliminación por ciclos.

Otra posibilidad es plantear el problema de diagonalizar una matriz compleja de n dimensiones como el de diagonalizar una matriz real de $2n$ dimensiones. Podemos escribir una matriz hermítica como

$$H = A + iB$$

donde A y B son matrices reales que cumplen

$$\begin{aligned} A^T &= A \\ B^T &= -B \end{aligned}$$

El problema de encontrar los valores propios λ correspondientes a los vectores propios (complejos) $x = u + iv$ lo podemos plantear como

$$Hx = \lambda x$$

que se se puede expresar como

$$Au - Bv + i(Av + Bu) = \lambda(u + iv)$$

Este problema es equivalente al siguiente problema en $2n$ dimensiones:

$$\begin{bmatrix} A & -B \\ B & A \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}$$

donde matriz extendida

$$\begin{bmatrix} A & -B \\ B & A \end{bmatrix}$$

es obviamente simétrica. Los valores propios de la matriz H aparecen repetidos dos veces, con vectores propios (u, v) y $(-v, u)$.

En general, en compiladores eficientes, la utilización de la clase `complex` permite resolver el problema en el campo complejo más rápidamente que el problema asociado en el campo real, aunque el factor de velocidad nunca llegue a 2 (lo cual sólo se consigue prescindiendo de la clase `complex` y programando las operaciones de complejos en aritmética real). La diagonalización de matrices hermíticas es un problema ubiquo en Mecánica Cuántica y todas las disciplinas que la utilizan (Física Nuclear, Física Atómica, ...).