

Capítulo 4

Diagonalización de matrices

El problema de diagonalización de matrices consiste en, dada una matriz A , encontrar una aplicación lineal S tal que A se reduzca 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 $|A - \lambda I|$:

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

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

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

tiene n soluciones, no necesariamente distintas.

2. Construir la aplicación lineal buscada S con columnas dadas por los vectores propios v_k normalizados a la unidad, obtenidos como solución de los 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. 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.

Esta receta no es eficiente para desarrollar métodos numéricos. 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 que existen 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 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. Vamos a ver el método de Jacobi.

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

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

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 las 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

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

donde, definiendo

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

la anulación de a'_{pq} nos da las relaciones

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

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

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

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 anulación de a_{pq} , como:

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

donde

$$\tau = \tan \frac{\theta}{2} = \frac{s}{1+c} \tag{4.10}$$

Esta es la relación que se debe de utilizar para actualizar A en cada iteración en la programación del algoritmo, ya que como se puede observar 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 de actualización de A 4.8 quedan como:

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

Cuando sucede que $a_{pp} = a_{qq}$, entonces α es infinito. 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:

$$\begin{aligned}
 v'_{rs} &= v_{rs} \quad r \neq p, s \neq q \\
 v'_{rp} &= cv_{rp} - sv_{rq} \\
 v'_{rq} &= sv_{rp} + cv_{rq}
 \end{aligned} \tag{4.11}$$

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

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, buscar el elemento con mayor valor absoluto fuera de la diagonal es muy costoso 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

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

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

$$\Delta' = \Delta - a_{pq}^2 \tag{4.13}$$

¹Determinar el elemento de mayor valor absoluto implica $\frac{n(n-1)}{2}$ comparaciones, mientras que actualizar la matriz después de una iteración implica actualizar $2n+1$ 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 $n(n-1)t_{compar} > 2(2n+1)t_{actual}$ entonces determinar el mayor elemento cuesta más tiempo que la iteración. Cuando n es enorme nt_{compar} puede ser muchas veces mayor que $4t_{actual}$.

Como podemos anular el a_{pq} que deseemos, es obvio que el método es convergente. Cuando se programa el algoritmo, ϵ es la tolerancia especificada. 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 $a_{pq}^2 < \delta$ entonces se salta la rotación para dicho elemento. Se puede fijar δ como por ejemplo un orden de magnitud inferior al valor promedio de a_{pq}^2 cuando se alcanza la tolerancia ϵ :

$$\delta = \frac{1}{10} \frac{2\epsilon}{n(n-1)} \simeq \frac{\epsilon}{5n^2}$$

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 4.7 y seguidamente τ mediante la ecuación 4.10. A continuación se procede a la actualización de A y de los 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

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

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

$$\begin{aligned} a'_{11} &= a_{11} - ta_{12} = 2 + 1 = 3 \\ a'_{12} &= 0 \\ a'_{22} &= a_{22} + ta_{12} = 2 - 1 = 1 \\ a'_{31} &= a_{31} - s(a_{32} + \tau a_{31}) = 0 - \frac{1}{\sqrt{2}}(-1 + \frac{1}{1+\sqrt{2}}0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ a'_{32} &= a_{32} + s(a_{31} - \tau a_{32}) = -1 + \frac{1}{\sqrt{2}}(0 + \frac{1}{1+\sqrt{2}}) = -\frac{1+\sqrt{2}}{2+\sqrt{2}} \\ v'_{13} &= v'_{23} = v'_{31} = v'_{32} = 0; \quad v'_{33} = 1; \\ v'_{11} &= cv_{11} - sv_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad v'_{12} = sv_{11} + cv_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ v'_{21} &= cv_{21} - sv_{22} = -\frac{1}{\sqrt{2}}; \quad v'_{22} = sv_{21} + cv_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

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_{31} y procedemos análogamente.

4.2. Matrices hermíticas

Una matriz H es hermítica si cumple que es igual ala 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

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

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

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

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

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

que se pueden escribir de la forma mas compacta

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

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.

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 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 básico en Mecánica Cuántica y todas las disciplinas que la utilizan (Física Nuclear, Física Atómica, ...).