



SJÄLVSTÄNDIGA ARBETEN I MATEMATIK

MATEMATISKA INSTITUTIONEN, STOCKHOLMS UNIVERSITET

Om negativa egenvärden för kvantgrafer

av

Christian Johhaji

2019 - No K34

Om negativa egenvärden för kvantgrafer

Christian Jokhaji

Självständigt arbete i matematik 15 högskolepoäng, grundnivå

Handledare: Annemarie Luger

2019

Abstract

The evolution of quantum graphs started during the 1930s when Linus Pauling, one of the founders of quantum chemistry, began to study organic conjugated molecules. More recently, quantum graphs have been used in chemistry to study the vibrational quantum dynamics of the lower energy levels and also if it is possible to recreate these lower energy levels with good accuracy.

This text is more mathematical and is about negative eigenvalues of quantum graphs. We are going to analyze how the amount of negative eigenvalues depends on the geometrical structure of the quantum graph. The text is divided into three parts. First, we will determine the vertex conditions for a linear map on a finite interval. The linear map T that we will use is so called self-adjoint, which means one of its properties is that T is symmetric. We will show that T is symmetric by taking the differences in scalar product. In the second part, we will go through a couple of examples with a differential operator on an interval. The differential operator that we will use is a so called *Laplace operator*. Followed by the third part, where we will analyze the negative eigenvalues for some quantum graphs with some specific vertex conditions.

Självständigt arbete 15hp
Om negativa egenvärden för kvantgrafer

Christian Jokhaji
Handledare: Annemarie Luger

Augusti 2019

Innehållsförteckning

1	Introduktion	4
2	Kvantgrafer	5
2.1	Metrisk graf	5
2.2	Operator	6
2.3	Självadjungerad avbildning	6
3	Nodvillkor	8
3.1	Nodvillkor för avbildningen T	8
3.1.1	Separerade nodvillkor	9
3.2	Nodvillkor för matriserna A och B	10
3.2.1	Inverterbar A eller B	10
3.3	A och B icke-inverterbar	10
3.3.1	Beräkning med matris A då kolonn 1 är nollor	11
3.3.2	Beräkning med matris A då rad 1 är nollor	12
3.3.3	Enbart element a_{22} är nollskiljt i A	13
4	Egenvärden på ett intervall	13
4.1	Dirichletvillkor	14
4.2	Neumannvillkor	15
4.3	Ringvillkor	16
4.4	Exempel på negativa egenvärden	17
5	Negativa egenvärden	19
5.1	Standardvillkor och antal egenvärden	19
5.2	Sylvesterkriteriet	20
5.3	Standardvillkor för en lasso graf	21
5.4	Kvantgraf med flera noder	23

6	Parametrisering	26
6.1	Bevis av parametriseringen	26
7	Exempel på en kvantgraf: Lasso grafen	29
8	Avslutningsord	33
9	Referenser	34

1 Introduktion

Matematiskt är en *kvantgraf* en metrisk graf där man applicerar en differentialoperator på kanterna med olika nodvillkor för noderna som binder ihop grafen. Utvecklingen av kvantgrafer började under 1930-talet då Linus Pauling, en av grundarna till kvantkemin, började studera organiska konjugerade molekyler. Ett konjugerat system innebär att en molekyl har enkelbindningar men även multipletbindningar, där elektronerna delokaliseras över hela systemet tillåts. Det Pauling studerade var spektrum från de delokaliserade elektronerna i systemet från exempelvis den organiska molekylen naftalen. Då naftalen har både enkelbindningar och dubbelbindningar så kan man se enkelbindningarna som begränsade kanter för de fria elektronerna, till en kvantgraf. Enkelbindningarna kallas även för σ -bindningar.[1]

Mer inom kvantkemi så har vibrations kvantgrafer används för att förstå vibrations kvantdynamiken för de låga energinivåerna i molekylen CH_5^+ , protonerad metan eller metonium, och är det även möjligt att återskapa dessa låga energinivåerna, med god noggrannhet. Molekylen CH_5^+ kan tolkas som "noderna av kvantgrafen representerar versioner av jämnvikts strukturen med distinkta atomnummer, medan kanterna refererar till kollektiv kärnrörelse som omvandlar jämnvikts strukturen versionen till en annan" enligt [2]. Läsaren hänvisas till referens [2] för att läsa mer om just denna studie.

Syftet med detta arbete är mer matematiskt. Vi ska undersöka antalet negativa egenvärden av kvantgrafer som är beroende av grafens utseende. Innan vi går in på negativa egenvärden kommer vi först diskutera nodvillkoren för en linjär avbildning inom ett ändligt intervall, följt av några problem exempel där vi ska lösa en differentialekvation med nodvillkor. Tillsist ska vi gå igenom negativa egenvärden för vissa kvantgrafer och hur man går tillväga för att beräkna antalet av dessa på ett mer allmänt sätt.

Nodvillkoren som vi först kommer diskutera är för den linjära avbildningen T sådan att T är självadjungerad, där $T(y) := -y'' + q(x)y$ inom intervallet $[0, L]$. Då linjära avbildningen T är självadjungerad innebär det bland annat att den även är symmetrisk, det vill säga skillnaden i skalärprodukten är lika med noll, $\langle Ty_1, y_2 \rangle = \langle y_1, Ty_2 \rangle$. Detta kommer ge oss några nodvillkor som kallas Dirichlet-, Neumann- och Robinvillkor, men även ett så kallad ringvillkor. Ringvillkoret kan man även hitta i andra texter som periodiska villkor. Utöver dessa nodvillkor så finns det självklart flera andra, några av dessa kommer vi gå igenom.

Då vi har bestämt nodvillkoren, för avbildningen, kommer vi in på andra delen av arbetet. Här kommer vi att beräkna egenvärdena $\lambda \in \mathbb{R}$ för ekvationen $Ty = \lambda y$ så att den har en icke-trivial lösning, $y \neq 0$, inom intervallet $[0, L]$. Denna ekvation kommer vi att lösa för Dirichlet-, Neumann- och ringvillkoret. Resultatet av detta kommer visa att ekvationen inte har några negativa

egenvärden för villkoren.

Detta leder oss till tredje delen av arbetet där negativa egenvärden till olika kvantgrafer ska bestämmas med specifika nodvillkor. I detta arbete kommer vi till mesta dels fokusera på så kallade standardvillkor, men vi kommer även gå in på några andra villkor. En av dessa kvantgrafer är bland annat en så kallad lasso-graf som har två ändliga intervall och ett halvändligt intervall.

2 Kvantgrafer

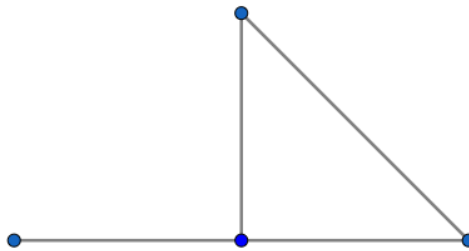
En *kvantgraf* definieras av tre delar:

- En metrisk graf
- En differentialoperator agerande på grafens kanter
- Nodvillkor vid noderna

2.1 Metrisk graf

Första delen av en kvantgraf är att definiera vad en metrisk graf är för något.

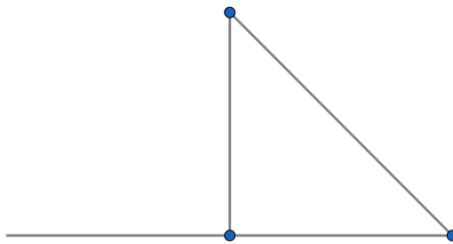
Definition 2.1: En *graf* G består av noder och kanter. Noder tillhör en ändlig mängd V och kanter en mängd E . Två närliggande noder binds samman av en kant, därmed kan E ses som två-del mängder av V [3, s.178].



Figur 2.1: Exempel på en graf. De blåa prickarna kallas för noder och mellan noderna går kanter.

Mängden av kanter i den graf betecknar vi med E_n . När två eller flera kanter möts vid en punkt så kallas denna punkt för en nod. Mängden av noderna betecknar vi med V [4]. För en metrisk graf så kan man dela upp kanterna till två olika mängder, ändliga och halvändliga kanter. De ändliga kanterna kallas även för interna kanter och betecknas med mängden I , där varje individuella kant ges av $i \in I$. De halvändliga kanterna kallas även för externa kanter som betecknas med mängden \mathcal{E} , där varje individuella extern kant ges av $e \in \mathcal{E}$.

Istället för att kolla på varje kant bara som en del av grafen G så kan man se varje individuella kant som ett reellt intervall l . För en intern kant ges intervallet av $l_i = [0, a_i]$, där 0 är början av intervallet och $a_i > 0$ är slutet av intervallet. För en extern kant så ges intervallet av $l_e = [0, \infty)$ som har en oändlig positiv längd [5]. De två mängderna tillsammans, E_n och V , ger en metrisk graf Γ , se Figur 2.2 för ett exempel. Antalet kanter som binds samman vid en nod betecknas med d_n [4].



Figur 2.2: Exempel på en metrisk graf med tre ändliga kanter och en halvändlig kant.

2.2 Operator

Andra delen för att få en kvantgraf är att applicera en differentialoperator på kanterna i Γ .

En differentialoperator är något som utför en operation på en funktion f , till exempel genom att derivera f . Den vanligaste differentialoperatoren är $\frac{d}{dx}$ som deriverar f , så man kan skriva den som $\frac{d}{dx}f = f'$. I detta arbete kommer vi enbart att fokusera på den så kallade *Laplaceoperatoren*, $-\frac{d^2}{dx^2}$. Om vi lägger till en reellvärd funktion $q(x)$ till Laplaceoperatoren så får vi $-\frac{d^2}{dx^2} + q(x)$, som kallas *Schrödingeroperator*. Inom kvantmekanik undersöker man mycket om partiklars rörelse och elektroners rörelse runt en atom. I detta fall innebär Schrödingeroperatoren att man undersöker partikelns rörelse och dess påverkan av en elektrisk potential q . Partikeln som kan vara en elektron rör sig runt en atom, där sträckan runt atomen kan ses som en kant. I detta arbete kommer vi att använda oss av $q(x)$ lika med noll, så Schrödingeroperatoren blir Laplaceoperatoren [4].

2.3 Självadjungerad avbildning

Tredje delen för att få en kvantgraf är att det måste finnas nodvillkor vid noderna som förklarar hur varje kant i grafen är kopplade till varandra. Dessa villkor är specifika för varje nod i grafen. Dessutom ser de till att den linjära avbildningen som används är självadjungerad.

Avbildningen T som vi applicerar på kanterna i kvantgrafan Γ måste vara linjär och självdjungerad. Rummet där T agerar är ett Hilbert rum. Mer specifikt är det rummet $L^2(\Gamma)$, det vill säga kvadratiskt integrerbara funktioner på kanterna i grafen. Hilbert rummet tar inte hänsyn till nodernas geometri, det vill säga hur de är kopplade till varandra, och därför måste vi använda oss av randvärdena vi ändpunkterna x_j av en funktion

$$y(x_j) = \lim_{x \rightarrow x_j} y(x)$$

och funktionens normala derivata.

Den normala derivatan är oberoende av vilken riktning som kanten är parametriserad på och pekar alltid inåt i intervallet [4]. Därför måste en av derivatorna ha ett negativt tecken. Detta medför att båda derivatornas riktningar är lika i intervallet. Mer djupgående om detta kommer vi inte gå igenom då det är överkurs för arbetet och därmed lämnas åt läsaren att läsa i [4].

Nodvillkoren går att skriva med två matriser A och B . Avbildningen är specifik för varje par av matriser A och B , och därmed skriver vi $T_{A,B}$ istället för bara T . Avbildningen $T_{A,B}$ är linjär då den uppfyller följande:

- $D(T_{A,B}) \subseteq L^2(\Gamma) \rightarrow L^2(\Gamma)$
- $D(T_{A,B}) = \{y \in D_{max} \text{ och uppfyller nodvillkoren } A\vec{y} + B\vec{y}' = 0\}$
- $D_{max} = \{y \in C^2 \cap L^2 : -y'' + qy \in L^2\}$

$$\vec{y} := \begin{pmatrix} \{y_e(0)\}_{e \in \mathcal{E}} \\ \{y_i(0) \\ y_i(a_i)\}_{i \in I} \end{pmatrix}, \vec{y}' := \begin{pmatrix} \{y'_e(0)\}_{e \in \mathcal{E}} \\ \{y'_i(0) \\ -y'_i(a_i)\}_{i \in I} \end{pmatrix}$$

där $e \in \mathcal{E}$ är de halvändliga kanterna och $i \in I$ är de ändliga kanterna.

Den maximala definitionsmängden för operatören, D_{max} , beror ju självklar på vilken avbildning som används. Nu sätter vi ett krav på matris paret A och B , vilket är att de måste vara *Nevanlinna par*.

Definition 2.2: Ett par $\{A, B\}$ av $d \times d$ matriser sägs vara *Nevanlinna par* om $AB^* = BA^*$ och om $d \times 2d$ matrisen $[A, B]$ har en maximal rank d [5]. Detta göra att vi kan formulera en sats.

Sats 2.1: För varje Nevanlinna par $\{A, B\}$ är den linjära avbildningen $T_{A,B}$ självdjungerad [5].

Om det finns ett egenvärden λ av $T_{A,B}$ sådana att det existerar ett y i $L^2(\Gamma)$, där y inte är nollfunktionen, så gäller $T_{A,B} \cdot y = \lambda y$. Om dessa egenvärden existerar så kommer vi senare delvis beräkna dessa men i andra fall bara bestämma antalet som finns.

3 Nodvillkor

3.1 Nodvillkor för avbildningen T

Vi ska första diskutera nodvillkoren för avbildningen T inom intervallet $[0, L]$. Vi har diskuterat att avbildningen $T_{A,B}$ är linjär och självadjungerad. Att avbildningen är självadjungerad innebär även att avbildningen är symmetriskt, det vill säga $\langle Ty_1, y_2 \rangle = \langle y_1, Ty_2 \rangle$.

Definition 3.1: Skalärprodukten för två funktioner f och g , som tillhör \mathbb{C} , ges av $\langle f, g \rangle = \int_{\Gamma} f \bar{g} dx$ [6].

För att visa att avbildningen är symmetrisk, inom intervall $[0, L]$, så kan vi ta differensen av skalärprodukterna, $\langle Ty_1, y_2 \rangle - \langle y_1, Ty_2 \rangle = 0$. Funktionerna y_1 och y_2 är funktioner som uppfyller villkoren från ovan. Vi börjar med att utveckla skalärprodukten av båda termerna. Vi påminner $q = 0$ och vi utför en partiell integration. Efter att man har förkortat så långt som möjligt har vi ekvation (1),

$$\begin{aligned} \langle Ty_1, y_2 \rangle - \langle y_1, Ty_2 \rangle &= \\ \int_0^L ((-y_1'')\bar{y}_2 - y_1\overline{(-y_2'')})dx &= \\ [-y_1'\bar{y}_2]_0^L + \int_0^L y_1'\bar{y}_2 dx + [y_1\bar{y}_2']_0^L - \int_0^L y_1\bar{y}_2' dx &= \\ y_1(0)\bar{y}_2'(0) - y_1'(0)\bar{y}_2(0) - y_1(L)\bar{y}_2'(L) + y_1'(L)\bar{y}_2(L) & \quad (1) \end{aligned}$$

Det vi vill göra nu är att bestämma nodvillkoren för då (1) är lika med 0. Då kan vi skriva (1) som en determinant, vilket gör det enklare att se de villkoren.

$$- \left[\begin{array}{cc} y_1(x) & \overline{y_2(x)} \\ y_1'(x) & \overline{y_2'(x)} \end{array} \right]_{x=0}^{x=L} = 0$$

Nu när vi har beräknat skillnaden i skalärprodukten och uttryckt den som en determinant, så ser vi några vanliga villkor. Om vi sätter båda funktionsvärdena vid 0 och L lika med noll så får vi Dirichletvillkoret. Neumannvillkoret får vi då derivatornas värden är noll. Om funktionsvärdet vid 0 är beroende av derivatans värdet vid 0, och liknande för vid L , så får vi Robinvillkoret. Medans om funktionsvärdet vid 0 är beroende av funktionsvärdet vid L , och liknande för derivatorna, så får vi ringvillkoret. Alla fyra villkoren är givna nedan:

- Dirichletvillkor: $T_D := \{y(0) = y(L) = 0\}$
- Neumannvillkor: $T_N := \{y'(0) = y'(L) = 0\}$
- Robinvillkor: $T_R := \{y(0) = \alpha y'(0), y(L) = \beta y'(L), \alpha, \beta \in \mathbb{R}\}$
- Ringvillkor: $T_{Ring} := \{y(0) = y(L), y'(0) = y'(L)\}$.

3.1.1 Separerade nodvillkor

Dirichlet-, Neumann- och Robinvillkoret tillhör så kallade *separerade nodvillkor* där funktionsvärdet av y i en viss punkt endast är beroende av funktionsvärdet av y' i samma punkt. Separerade nodvillkor kallas även ibland för lokala nodvillkor. Grafen som dessa villkor agerar på har två noder och en kant. I detta fall så börjar grafen vid noden 0 och slutar vid noden L , se Figur 3.1.



Figur 3.1: Kvantgraf intervallet börjar vid 0 och slutar vid L .

Om vi skriver om ekvation (1) sådant att vi har funktionsvärdena för 0 på vänsterledet och för funktionsvärdena för L på högerledet, ges

$$y_1(0)\overline{y_2'(0)} - y_1'(0)\overline{y_2(0)} = y_1(L)\overline{y_2'(L)} - y_1'(L)\overline{y_2(L)}. \quad (2)$$

Vi kan även tolka separerade nod villkoren som om vi sätter höger- respektive vänsterledet lika med noll. Om vi fokuserar på vänsterledet och skriver den som en determinat så får vi följande

$$\begin{vmatrix} y_1(0) & \overline{y_2(0)} \\ y_1'(0) & \overline{y_2'(0)} \end{vmatrix} = 0.$$

Om vi bortser från det triviala fallet då y_1 och y_1' är 0 eller då y_1 och y_2 är 0 så är kolonn 1 linjärt beroende av kolonn 2, det vill säga de har samma riktning. Det betyder att att båda kolonnerna är ortogonala mot samma riktning också som vi kan kalla för (a, b) . Då kan vi skriva vänsterledet från (2) på formen $ay(0) + by'(0) = 0$, där a och b är reella konstanter. Om vi dividerar med $\sqrt{a^2 + b^2}$ får vi en ekvivalent ekvation, $\frac{ay(0)}{\sqrt{a^2 + b^2}} + \frac{by'(0)}{\sqrt{a^2 + b^2}} = 0$. Ekvationerna är ekvivalenta men nu kan man tolka detta som koordinater på enhetscirkeln. Detta gör vi genom att sätta $\frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}} = \cos(\alpha)$ och $\frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} = \sin(\alpha)$ där $\alpha \in [0, 2\pi]$. Samma resonemang gäller för högerledet i (2), men då använder vi β istället för α . Nu kan vi representera alla separerade nod villkor på följande allmänna sätt

$$\begin{aligned} \cos(\alpha) \cdot y(0) + \sin(\alpha) \cdot y'(0) &= 0 \\ \cos(\beta) \cdot y(L) + \sin(\beta) \cdot y'(L) &= 0. \end{aligned}$$

Där α och β kan anta värden mellan 0 och 2π .

3.2 Nodvillkor för matriserna A och B

Nu ska vi bestämma de resterande nodvillkoren för en kvantgraf som har två noder och en intern kant som börjar vid 0 och slutar vid L , se Figur 3.1. Det vi ska göra är att skriva matriserna A och B för $A\vec{y} + B\vec{y}' = 0$ med randvärdena

$$\vec{y} = \begin{pmatrix} y(0) \\ y(L) \end{pmatrix} \text{ och } \vec{y}' = \begin{pmatrix} y'(0) \\ -y'(L) \end{pmatrix}$$

där $y'(L)$ är negativt tecken så att den ska ha rätt riktning. Vektorerna i vårt fall har två element, vilket medför att matriserna A och B är 2×2 matriser med en maximal rang för (A, B) på 2. För att skriva våra kvadratiska matriser inser vi att vi måste gå igenom tre olika fall. Dessa fall är då A är inverterbar, då B är inverterbar och då ingen av matriserna är inverterbar.

3.2.1 Inverterbar A eller B

Om vi börjar med fallet då A är inverterbar, så kan vi skriva om $A\vec{y} + B\vec{y}' = 0$ på följande sätt

$$\vec{y} + A^{-1}B\vec{y}' = 0 \Leftrightarrow \vec{y} + C\vec{y}' = 0,$$

där $C := A^{-1}B$. Matriserna A och B är *Nevanlinna par* då vi istället använder oss av matriserna C och I . Identitetsmatrisen kommer från att $I\vec{y} = \vec{y}$,

$$\text{rank}(I, C) = 2, IC^* = CI^*$$

Detta medför alla nodvillkor för $C := A^{-1}B$. Om C är I så får vi *ringvillkoret*, och om C är nollmatrisen så får vi *Dirichlet villkoret*. Men enbart Dirichletvillkoret gäller för kvantgrafen i Figur 3.1, ringvillkoret gäller inte för den.

På liknande sätt kan vi göra om B är inverterbar. Vi skriver om $A\vec{y} + B\vec{y}' = 0$ på följande sätt

$$B^{-1}A\vec{y} + \vec{y}' = 0 \Leftrightarrow C\vec{y} + \vec{y}' = 0,$$

där $C := B^{-1}A$ och likt förra fallet så uppfylls villkoren för *Nevanlinna par*. I detta fall, om C är nollmatrisen ges *Neumannvillkoret*.

3.3 A och B icke-inverterbar

Först undersöker vi vad som händer då en av matriserna är nollmatrisen. Om $A = 0$, medför det att $A\vec{y} + B\vec{y}' = 0$ blir $B\vec{y}' = 0$. Om B även skulle vara nollmatrisen, uppfylls inte rangvillkoret för *Nevanlinna par* vilket medför att B måste vara nollskiljt. Rangvillkoret $\text{rank}(A, B) = 2$ uppfylls om och endast om matrisen B har en maximal rang på två, därmed blir $\vec{y}' = 0$.

Då $B = 0$ löser vi med samma argument som för $A = 0$. Då $B = 0$, uppfylls rangvillkoret om och endast om A har maximal rang på 2, vilket medför att

$\vec{y} = 0$.

Nu undersöker vi då båda matriserna A och B är nollskiljda. Vi undersöker vad som händer då första elementet i A , a_{11} , är lika med noll. Vi vet att A inte ska vara inverterbar vilket betyder att dess determinant ska vara lika med noll. Det betyder att vi kan bestämma de andra elementen i matrisen.

$$\det(A) = \begin{vmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = (0 * a_{22} - a_{21} * a_{12}) = 0,$$

där vi ser att detta betyder att någon av elementen a_{12} och a_{21} måste vara noll och element a_{22} kan vara nollskiljt. Vi måste lösa $A\vec{y} + B\vec{y}' = 0$ för två olika A matriser,

$$A = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \quad (3)$$

och

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (4)$$

3.3.1 Beräkning med matris A då kolonn 1 är nollor

Nu måste vi bestämma de resterande elementen i A , i (6), och detta gör vi genom att fokusera på villkoret att $AB^* = BA^*$ ska uppfyllas. Om vi skriver ut det får vi

$$\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{b_{11}} & \overline{b_{21}} \\ \overline{b_{12}} & \overline{b_{22}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \overline{a_{12}} & \overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$
$$\begin{pmatrix} a_{12}\overline{b_{12}} & a_{12}\overline{b_{22}} \\ a_{22}\overline{b_{12}} & a_{22}\overline{b_{22}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{12}\overline{a_{12}} & b_{12}\overline{a_{22}} \\ b_{22}\overline{a_{12}} & b_{22}\overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$

Vi ser nu att elementen i respektive position måste vara lika i båda matriserna, därmed kan man sätta de lika med varandra.

$$\begin{aligned} a_{12}\overline{b_{12}} &= b_{12}\overline{a_{12}} & a_{12}\overline{b_{22}} &= b_{12}\overline{a_{22}} \\ a_{22}\overline{b_{12}} &= b_{22}\overline{a_{12}} & a_{22}\overline{b_{22}} &= b_{22}\overline{a_{22}} \end{aligned}$$

Före vi börjar lösa dessa ekvationer så kan vi utesluta ekvationen $a_{12}\overline{b_{22}} = b_{12}\overline{a_{22}}$ då den är kongugatet till $a_{22}\overline{b_{12}} = b_{22}\overline{a_{12}}$. Vi går igenom fallet då a_{12} är skiljt från noll. Vi kan skriva $a_{12} = 1$, då man kan multiplicera med en multipel istället och det gör beräkningen enklare. Genom att sätta $a_{12} = 1$, så ser vi att $\overline{b_{12}} = b_{12}$ vilket gäller om och endast om b_{12} är reellt.

Vi undersöker då $a_{22} = 0$, vilket medför att $b_{22} = 0$. Detta betyder att vi får matriserna

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ och } B = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & 0 \end{pmatrix},$$

där b_{11} inte har några villkor, $b_{12} \in \mathbb{R}$ och $b_{21} \neq 0$, vilket måste gälla för att villkoret $\text{rank}(A, B) = 2$ ska uppfyllas.

Nu bestämmer vi A då $a_{22} \neq 0$. Detta gör vi genom att multiplicera A med en inverterbar matris från vänster och försöka få en matris med enbart element a_{12} . Vi kallar den inverterbara matrisen för G , som består av heltals konstanter. Vi kollar på villkoret att $AB^* = BA^*$ som även går att skriva som $B^*A = A^*B$. Om vi multiplicerar med G från vänster så får vi

$$\begin{aligned}(GB)^*(GA) &= (GA)^*(GB) \\ B^*G^*GA &= A^*G^*GB.\end{aligned}$$

Det innebär att om vi ska kunna multiplicera med en inverterbar matris G så måste den även vara unitär för att $AB^* = BA^*$ ska uppfyllas. Villkoret att de ska ha rank 2 uppfylls och går att kolla lätt.

Vi börjar med att multiplicera A med G och produkten av GA kallar vi R .

$$\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & x + ya_{22} \\ 0 & z + wa_{22} \end{pmatrix}$$

Unitära matriser har en determinant på 1, och determinanten för G blir $xw - zy = 1$. Då vi enbart vill ha elementet $a_{12} = 1$ i matrisen R så betyder det att vi får ekvationssystemet

$$\begin{cases} x + ya_{22} = 1 \\ z + wa_{22} = 0 \end{cases}$$

Från detta får vi att $a_{22} = -\frac{z}{w}$ och att $x = -a_{22}y + 1 = \frac{z}{w}y + 1$. Vi ser även att man kan skriva om x till $xw - zy = 1$, vilket är determinanten av G och därmed är verkligen en unitär matris. Nu sätter vi in dessa värden i matrisen R och ser att den enbart har ett element och resterande är nollor,

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Det vi har fått fram är att matrisen R ser likadan ut som A då $a_{22} = 0$. Detta betyder att om vi multiplicerar G med B från vänster så kommer vi få dess produkt, som vi kallar P , på liknande struktur som för B så $a_{22} = 0$. Detta gör att vi får

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ och } P = \begin{pmatrix} \tilde{b}_{11} & \tilde{b}_{12} \\ \tilde{b}_{21} & \tilde{b}_{22} \end{pmatrix},$$

med villkoren att \tilde{b}_{12} och \tilde{b}_{22} är reella, inget villkor på \tilde{b}_{11} och att $\tilde{b}_{21} \neq 0$.

3.3.2 Beräkning med matris A då rad 1 är nollor

Nu när vi ska beräkna med (4) så ska vi göra på liknande sätt som vi gjorde för (3) och vi multiplicerar med en inverterbar, unitär, matris från vänster

bestående av heltals konstanter, och försöka få enbart ett element i produkten och resterande noll.

$$\begin{pmatrix} x & y \\ z & w \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ya_{21} & ya_{22} \\ wa_{21} & wa_{22} \end{pmatrix}$$

Vi märker att det inte går att få enbart ett element i matrisen genom att multiplicera med en inverterbar matris. Detta innebär att vi inte kan använda oss av (4).

3.3.3 Enbart element a_{22} är nollskilt i A

Vi börjar med villkoret $AB^* = BA^*$, vilket ger oss

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overline{b_{11}} & \overline{b_{21}} \\ \overline{b_{12}} & \overline{b_{22}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a_{22}\overline{b_{12}} & a_{22}\overline{b_{22}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & b_{12}\overline{a_{22}} \\ 0 & b_{22}\overline{a_{22}} \end{pmatrix}$$

Villkoret uppfylls då $b_{12} = 0$ och sen innan har vi att a_{22} och b_{22} är reella. Det andra villkoret om maximal rang ser vi att den uppfylls då man kan reducera ner matriserna till enbart två element. Detta betyder att våra matriser blir

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} \text{ och } B = \begin{pmatrix} b_{11} & 0 \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}$$

Avsnitten 3.2 och speciellt 3.3 har varit ganska röriga och ganska komplicerad för att hitta alla nodvillkor. Detta kommer bli enklare senare då vi inför en parametrering från två matriser till en matris, vilket kommer göra det enklare att finna dessa villkor och vi kommer även gå igenom några exempel.

4 Egenvärden på ett intervall

Nu ska vi finna egenvärden till differentialekvationen $Ty = \lambda y$ med avseende till nodvilkoren Dirichlet, Neumann och ring. Innan vi börjar beräkna egenvärdena så kan vi med att börja ange en sats och bevis.

Sats 4.1: Om operatorn T är symmetrisk så innebär det att dess egenvärden är reella.

Bevis: Operatorn T är symmetrisk innebär att $\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle$. Om vi låter x_0 vara en icke-trivial egenvektor och om λ är ett egenvärde så har vi att $Tx_0 = \lambda x_0$. Från detta får vi att

$$\langle Tx_0, x_0 \rangle = \langle \lambda x_0, x_0 \rangle = \lambda \langle x_0, x_0 \rangle$$

och

$$\langle x_0, Tx_0 \rangle = \langle x_0, \lambda x_0 \rangle = \bar{\lambda} \langle x_0, x_0 \rangle.$$

Detta innebär att $\langle x_0, x_0 \rangle (\lambda - \bar{\lambda}) = 0$. Eftersom egenvektorn x_0 är icke-trivial, det vill säga $\langle x_0, x_0 \rangle > 0$ så får vi att $(\lambda - \bar{\lambda}) = 0$ vilket medför att $\lambda = \bar{\lambda}$. \square

Differentialekvationen som vi ska lösa är $-y'' = \lambda y$, vilket är ekvivalent med

$$y'' + \lambda y = 0. \quad (5)$$

Nu ser vi att (5) är en homogen ekvation och där kan vi göra en ansats med $y = Ce^{rx}$ följt av insättning i (5) enligt [7, s.388]. Detta ger oss $Ce^{rx}(r^2 + \lambda) = 0$ och det karakteristiska polynomet $p(r) = r^2 + \lambda$. Funktionen $y = Ce^{rx}$ löser (5) om och endast om r är en rot till $p(r) = 0$. Det finns två olika fall för att bestämma rötterna, då $\lambda = 0$ och $\lambda \neq 0$. Rötterna till $p(r)$ då $\lambda = 0$ ger en dubbelrot på $r = 0$. Detta betyder att vi får lösningarna

$$y = C_1 x + C_2 \quad (6)$$

där C_1 och C_2 är komplexa konstanter. Nästa fall då $\lambda \neq 0$ ger att $r = \pm i\sqrt{\lambda}$. Då de två rötterna inte är lika, ges de samtliga lösningarna till (5) av

$$y = C_1 e^{i\sqrt{\lambda}x} + C_2 e^{-i\sqrt{\lambda}x} \quad (7)$$

enligt [7]. Konstanterna C_1 och C_2 är fortfarande komplexa. För att kunna lösa (5) sätter vi $\lambda = \omega^2$, $\lambda \in \mathbb{R}$, där $\omega \in \mathbb{C}$.

Det vi kommer göra nu är att bestämma egenvärdena λ för tre olika villkor, nämligen Dirichlet-, Neumann- och ringvillkoret.

4.1 Dirichletvillkor

Vi löser ekvation (6) och (7) med Dirichletvillkoret, $T_D := \{y(0) = y(L) = 0\}$. Vi börjar med att kolla vad (6) blir för villkoret, då $\lambda = 0$. Vi sätter in värdena i (6) vilket ger oss

$$\begin{cases} y(0) = C_2 = 0 \\ y(L) = LC_1 + C_2 = 0. \end{cases}$$

som ger oss att $C_2 = 0$ och $C_1 = 0$. Då får vi den triviala lösningen $y = 0$.

Vi fortsätter med att sätta in villkoren i (7), för $\lambda \neq 0$, vilket ger oss ekvationssystemet

$$\begin{cases} y(0) = C_1 + C_2 = 0 \\ y(L) = C_1 e^{i\omega L} + C_2 e^{-i\omega L} = 0. \end{cases}$$

Första ekvationen ger oss $C_2 = -C_1$ och genom att sätta in detta i andra ekvationen så får vi följande,

$$C_1(e^{i\omega L} - e^{-i\omega L}) = 0.$$

Om $C_1 = 0$ får vi den triviala lösningen $y = 0$ därför utgår vi från att $C_1 \neq 0$. Detta gör att vi kan dividera med C_1 som ger oss $e^{i\omega L} = e^{-i\omega L}$. Om vi sätter in $\omega = \alpha + i\beta$ och skriver om så att vi har termer med α på ett av leden och β på det andra ledet så får vi

$$e^{2\beta L} = e^{2i\alpha L}.$$

Vi vet att från *Eulers formel* är $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$, vilket betyder att vi kan skriva vår ekvation på följande form

$$e^{2\beta L} = \cos(2\alpha L) + i\sin(2\alpha L).$$

Nu utgår vi ifrån att $\beta \neq 0$ och vi vet att $e^{2\beta L}$ är både större än noll och även är reellt. Detta betyder att den imaginära delen måste vara 0 och därmed får vi att

$$\sin(2\alpha L) = 0$$

där vi löser ut α och ger oss $\alpha = \frac{\pi}{2L}n$, $n \in \mathbb{Z}$. Nu när vi har bestämt α så get det oss

$$\cos(2\alpha L) = \cos(n\pi) = (-1)^n.$$

Detta betyder att $e^{2\beta L} = 1$, vilket endast uppfylls då $\beta = 0$ och det betyder att Dirichletvillkoren inte ger några icke-reella eller negativa egenvärden på intervallet $[0, L]$. Eftersom $e^{2\beta L} = 1$ så innebär det att α har en period på 2π istället för π . Därmed får vi att $\alpha = \frac{\pi}{L}n$. Nu kan vi sätta in α och β i ω vilket ger oss $\omega = \frac{\pi}{L}n$, $n \in \mathbb{Z}$. Men $n \neq 0$ eftersom vi får den triviala funktionen i detta fall. För Dirichletvillkoren, på intervallet $[0, L]$, får vi funktionen

$$y = 2iC_1 \sin\left(\frac{\pi}{L}nx\right)$$

och de positiva reella egenvärdena

$$\lambda = \omega^2 = \left(\frac{\pi}{L}n\right)^2.$$

4.2 Neumannvillkor

På liknande sätt kan vi nu lösa ekvation (6) och (7) med Neumannvillkoren, $T_N := \{y'(0) = y'(L) = 0\}$. Åter igen börjar med att kolla vad (6) blir för villkoret, då $\lambda = 0$. Så vi deriverar (6) och sätter in villkoren, vilket ger oss

$$\begin{cases} y'(0) = C_1 = 0 \\ y'(L) = C_1 = 0. \end{cases}$$

som ger oss att $C_1 = 0$ och vi får lösningen $y = C_2$.

Vi fortsätter med (7), för $\lambda \neq 0$. Vi bestämmer dess derivata och sätter in villkoren, vilket ger ekvationssystemet

$$\begin{cases} y'(0) = i\omega C_1 - i\omega C_2 = 0 \\ y'(L) = i\omega C_1 e^{i\omega L} - i\omega C_2 e^{-i\omega L} = 0 \end{cases}$$

Första ekvationen ger oss att $C_1 = C_2$ som vi sätter in det i andra ekvationen så kan vi dividera med $i\omega C_1$. Vi utgår igen från att $C_1 \neq 0$, annars får vi den triviala lösning igen. Åter igen får vi $e^{i\omega L} = e^{-i\omega L}$ och om vi sätter in $\omega = \alpha + i\beta$ så kommer vi komma fram till samma ω som för Dirichletvillkoret. Neumannvillkoren ger inte några negativa egenvärden på intervallet $[0, L]$ och vi får samma positiva reella egenvärden som för Dirichletvillkoret men en annan funktion,

$$y = 2C_1 \cos\left(\frac{\pi}{L}nx\right)$$

$$\lambda = \omega^2 = \left(\frac{\pi}{L}n\right)^2.$$

Fallet då $n = 0$ är tillåtet här eftersom vi får den konstanta funktionen $y = 2C_1$ och egenvärdet $\lambda = 0$.

4.3 Ringvillkor

Ringvillkoren är $T_{Ring} := \{y(0) = y(L), y'(0) = y'(L)\}$ och för både (6) och (7) kommer vi använda respektive derivator. Se Figur 4.1 för att se intervallet för ringvillkoret.

Om vi börjar med (6), då $\lambda = 0$, och deriverar den, följt av insättning av villkoret så får vi

$$\begin{cases} C_2 = LC_1 + C_2 \\ C_1 = C_1 \end{cases}.$$

Det vi får från första ekvationen är att $C_1 = 0$ och vi får lösningen $y = C_2$, som Neumannvillkoret.

Vi fortsätter med (7), då $\lambda \neq 0$, och deriverar den. Genom insättning av villkoret ger det oss ekvationssystemet

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = C_1 e^{i\omega L} + C_2 e^{-i\omega L} \\ i\omega C_1 - i\omega C_2 = i\omega C_1 e^{i\omega L} - i\omega C_2 e^{-i\omega L} \end{cases}.$$

Vi kan förkorta den andra ekvationen med $i\omega$ och sedan skriva om till

$$\begin{cases} C_1(1 - e^{i\omega L}) + C_2(1 - e^{-i\omega L}) = 0 \\ C_1(1 - e^{i\omega L}) + C_2(-1 + e^{-i\omega L}) = 0 \end{cases}.$$

Detta är nu ett linjärt ekvationssystem med avseende på konstanterna C_1 och C_2 där dess determinant måste vara lika med noll, raderna är linjärt oberoende. Detta kommer från att om vi har en matris K så innebär det att ekvationen $K\vec{c} = 0$ har enbart en icke-trivial lösning om $\det K = 0$. Determinanten är

$$\begin{vmatrix} 1 - e^{i\omega L} & 1 - e^{-i\omega L} \\ 1 - e^{i\omega L} & -1 + e^{-i\omega L} \end{vmatrix} = 0,$$

vilket vi kan lösa och ge oss

$$(1 - e^{i\omega L})(-1 + e^{-i\omega L}) - (1 - e^{-i\omega L})(1 - e^{i\omega L}) = 0.$$

Detta ger oss två olika fall, $(1 - e^{i\omega L}) = 0$ eller $(-1 + e^{-i\omega L}) - (1 - e^{i\omega L}) = 0$. Det andra fallet kan vi skriva på samma forma som första fallet. Det betyder att vi ska lösa $(1 - e^{i\omega L}) = 0$. Vi sätter in $\omega = \alpha + i\beta$ vilket ger oss $e^{\beta L} = e^{i\alpha L}$. Åter igen kan vi använda oss av *Eulers formel*, vilket ger oss

$$e^{\beta L} = \cos(\alpha L) + i \sin(\alpha L)$$

där vi utgår ifrån att $\beta \neq 0$ och vi vet att $e^{2\beta L}$ är både större än noll och även är reellt. Det betyder att $\sin(\alpha L) = 0$ och att $\alpha = \frac{\pi}{L}n$, $n \in \mathbb{Z}$. Sätter vi in α i $\cos(\alpha L)$ får vi

$$\cos(\alpha L) = \cos(\pi n) = 1.$$

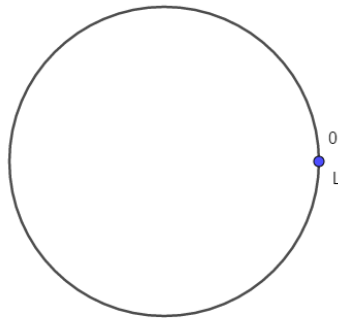
För att detta ska gälla så måste $\beta = 0$ och att α har åter igen en period på 2π istället för π . Vi får då att $\alpha = \frac{2\pi}{L}n$ och att $\omega = \frac{2\pi}{L}n$, $n \in \mathbb{Z}$, och ringvillkoret har inte heller några negativa lösningar. Ringvillkoret, i intervallet $[0, L]$, ger oss funktionen

$$y = C_1 e^{i\frac{2\pi}{L}nx} + C_2 e^{-i\frac{2\pi}{L}nx}$$

och egenvärdena

$$\lambda = \omega^2 = \left(\frac{2\pi}{L}n\right)^2.$$

Om vi jämför resultaten från Dirichlet- och Neumannvillkoret med ringvillkoret så ser vi att ringvillkoret ger en funktion som är både beroende av C_1 och C_2 . Så lösningen är en dubbel lösning och kan skrivas om som en linjär kombination av $e^{i\frac{2\pi}{L}nx}$ och $e^{-i\frac{2\pi}{L}nx}$, vilket vi inte kommer att göra.



Figur 4.1: Kvantgraf i form av en ring där intervallet börjar vid 0 och slutar vid L .

4.4 Exempel på negativa egenvärden

Ingen av egenvärdena som vi beräknade för Dirichlet- och Neumann- och ringvillkoret var negativa, på intervallet $[0, L]$. Nu går vi igenom ett exempel där vi kommer finna ett negativt egenvärde. Detta är ett exempel på Robinvillkoret i intervallet $[0, 2\pi]$ med villkoren $T_R := \{y(0) = y'(0), y(2\pi) = y'(2\pi)\}$. Åter

igen måste vi kolla då $\lambda = 0$ och $\lambda \neq 0$ för villkoret. Upprepar vi liknande beräkningar med (6) som för övriga villkor, för $\lambda = 0$, med Robinvillkoret så kommer vi komma fram till den triviala lösningen $y = 0$. Om vi fortsätter med $\lambda \neq 0$ och applicerar villkoret på (7) och dess derivata så får vi ekvationssystemet

$$\begin{cases} C_1 + C_2 = i\omega C_1 - i\omega C_2 \\ C_1 e^{i\omega 2\pi} + C_2 e^{-i\omega 2\pi} = i\omega C_1 e^{i\omega 2\pi} - i\omega C_2 e^{-i\omega 2\pi} \end{cases} .$$

Detta kan vi skriva om till

$$\begin{cases} C_1(1 - i\omega) + C_2(1 + i\omega) = 0 \\ C_1 e^{i\omega 2\pi}(1 - i\omega) + C_2 e^{-i\omega 2\pi}(1 + i\omega) = 0 \end{cases}$$

som är ett linjärt ekvationssystem med avseende på C_1 och C_2 . Detta betyder att dess determinant måste vara lika med noll. Determinanten blir

$$\begin{vmatrix} (1 - i\omega) & (1 + i\omega) \\ e^{i\omega 2\pi}(1 - i\omega) & e^{-i\omega 2\pi}(1 + i\omega) \end{vmatrix} = 0,$$

som vi kan lösa och ger oss

$$(1 - i\omega)(1 + i\omega)(e^{-i\omega 2\pi} - e^{i\omega 2\pi}) = 0.$$

Detta betyder att ekvationen går att lösa på tre olika sätt. Lösningar kan vi beräkna genom att sätta respektive parentes lika med noll. Från $(1 - i\omega)$ och $(1 + i\omega)$ får vi att $\omega = \pm i$. Egenvärdet blir då $\lambda = \omega^2 = -1$, vilket är vårt negativa egenvärde. Det andra sättet att lösa ekvationen är att $(e^{-i\omega 2\pi} - e^{i\omega 2\pi}) = 0$, som ger oss att $e^{4\pi i\omega} = 1$. Vi kan lösa detta på liknande sätt som innan och få fram att $\omega = \frac{n}{2}$, $n \in \mathbb{Z}$.

Det vi måste göra nu är att kolla vilka villkor som gäller för C_1 och C_2 . Det vi gör är att sätta in värdena för ω i ekvationssystemet innan. Gör vi detta får vi att för egenvärdet $\lambda = -1$ så får vi egenfunktionerna

$$y = C_2 e^x \text{ och } y = C_1 e^{-x},$$

det vill säga att i ena fallet är $C_1 = 0$ och i andra fallet är $C_2 = 0$. För egenvärdet $\lambda = (\frac{n}{2})^2$ där vi har att

$$C_1 = C_2 \left(\frac{2 + in}{2 - in} \right)$$

$$y = C_2 \left(\left(\frac{2 + in}{2 - in} \right) e^{i\frac{n}{2}x} + e^{-i\frac{n}{2}x} \right),$$

där $n = 0$ är tillåtet. Nu kan man se att Dirichlet- och Neumann- och Robinvillkoren är separerade nodvillkor eftersom de ger egenfunktioner som enbart beroende av en komplex konstant medans ringvillkoret är en linjär kombination av funktionerna.

5 Negativa egenvärden

5.1 Standardvillkor och antal egenvärden

Vi återgår nu till att bestämma antalet negativa egenvärden för avbildningen $T_{A,B}$ med matriserna A och B . För att kunna göra detta måste vi ta hänsyn till kvantgrafernas geometri, vilket vi gör genom att införa några symmetriska matriser. Vi inför först de symmetriska 2×2 matriserna $m_{i,0}$

$$m_{i,0} = \frac{1}{a_i} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix},$$

där $i \in I$, I är mängden ändliga kanter, och den symmetriska $d \times d$ matrisen M_0 definieras av

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0_{|\mathcal{E}|} & 0 \\ 0 & M_{I,0} \end{pmatrix}$$

där

$$M_{I,0} = \begin{pmatrix} m_{1,0} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & m_{|I|,0} \end{pmatrix},$$

där \mathcal{E} är mängden halvändliga kanter och $0_{|\mathcal{E}|}$ är nollmatrisen i $\mathbb{C}^{|\mathcal{E}|}$ [5]. Matrisen M_0 tillhör $\mathbb{C}^{|\mathcal{E}|+2|I|}$. Nu kan vi formulera satsen för att beräkna antalet negativa egenvärden.

Sats 5.1: Låt G vara en sammanhängande ändlig graf, och låt $T_{A,B}$ vara en självadjungerad realisering av Laplacian i $L^2(G)$, där

$$T_{A,B} = -\Delta,$$

$$D(T_{A,B}) = \{\psi \in D_{max} : A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0\},$$

där $\{A, B\}$ är Nevanlinna par och låt M_0 vara den symmetriska $d \times d$ matrisen från ovan. Då är antalet negativa egenvärden av T , $n_-(T)$, given av

$$n_-(T) = n_+(AB^* + BM_0B^*)$$

där n_+ är antalet positiva egenvärden av $(AB^* + BM_0B^*)$. Speciellt, T är icke-negativ om och endast om matrisen $AB^* + BM_0B^*$ är icke-positiv[5].

Beviset för satsen lämnas till läsaren att läsa i [5]. Den sista meningen i satsen innebär att avbildningen $T_{A,B}$ inte har några negativa egenvärden om och endast om matrisen $(AB^* + BM_0B^*)$ är negativt semidefinit.

Vektorerna $\vec{\psi}$ och $\vec{\psi}'$ i Sats 5.1 ges av

$$\vec{\psi} := \begin{pmatrix} \{\psi_e(0)\}_{e \in \mathcal{E}} \\ \{\psi_i(0)\}_{i \in I} \\ \{\psi_i(a_i)\}_{i \in I} \end{pmatrix}, \vec{\psi}' := \begin{pmatrix} \{\psi'_e(0)\}_{e \in \mathcal{E}} \\ \{\psi'_i(0)\}_{i \in I} \\ \{-\psi'_i(a_i)\}_{i \in I} \end{pmatrix}, \quad (8)$$

där $e \in \mathcal{E}$ är noderna för de halvändliga kanterna och $i \in I$ är noderna för de ändliga kanterna.

Det finns massor av olika nodvillkor, en av de enklare villkoren man kan börja med är så kallade *standardvillkor* [4] som ges av

*Funktionen ψ är kontinuerlig vid noderna V
Summan av derivatorna vid noderna är lika med noll.*

5.2 Sylvesterkriteriet

När man väl har beräknat matrisen $AB^* + BM_0B^*$ så kan det vara krävande att beräkna antalet positiva egenvärden och komma fram till slutsatsen att inga existerar. För att undvika detta kan man undersöka den resulterade matrisens teckenkaraktär. Detta gör vi med hjälp av *Sylvesterkriteriet*.

Definition 5.1: Teckenkaraktären för symmetriska matriser ges av följande:

- Matrisen R är positivt definit om och endast om alla egenvärden är positiva.
- Matrisen R är positivt semidefinit om och endast om egenvärdena endast är icke-negativa.
- Matrisen R är negativt definit om och endast om alla egenvärden är negativa.
- Matrisen R är negativt semidefinit om och endast om egenvärdena endast är icke-positiva.
- Matrisen R är indefinit om och endast om det finns både positiva och negativa egenvärden.[8]

För att kolla om en symmetrisk matris R är negativt semidefinit så är det samma som om att $-R$ är positivt semidefinit.

Sats 5.2: Sylvesterkriteriet säger att en matris är positivt definit om och endast om determinanten för varje kvadratisk block matris i R , från vänstra övre hörnet, är positiv. En matris är positiv semidefinit om och endast om alla determinanter av blockmatriserna med diagonal elementen av R är större eller lika med noll [9].

Vi går igenom ett kort exempel på hur man bestämmer tecken karaktären för en matris.

Exempel 1: Vi använder oss av matrisen A som är följande,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}.$$

Vad har matrisen A för tecken karaktär? Om vi börjar med att beräkna matrisens egenvärden så får vi egenvärdena $2, 0, a$. Eftersom vi har ett positivt egenvärdet och ett egenvärde som är 0 så får vi att

- $a \geq 0$ så är A positivt semidefinit
- $a < 0$ så är A indefinit.

Om vi istället använder oss av Sylvesterkriteriet, då beräknar vi determinanterna från vänstra övre hörnet.

$$\begin{aligned} \det A_1 &= 1, \\ \det A_2 &= \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{vmatrix} = 0, \\ \det A_3 &= \begin{vmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & a \end{vmatrix} = 0, \\ \det A_4 &= 1, \\ \det A_5 &= a, \\ \det A_6 &= \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & a \end{vmatrix} = a, \end{aligned}$$

De tre sista determinanterna beräknade vi för att den andra determinanten blev 0. Från detta kan vi bestämma att matrisen är positivt semidefinit för $a \geq 0$.

5.3 Standardvillkor för en lasso graf

Nu kommer vi gå igenom ett exempel där vi ska bestämma antalet positiva egenvärden för en så kallad lasso graf, Figur 5.1, vilket har två kanter. En av kanterna är ändlig och den andra kanten är en halvändlig. Båda kanterna delar samma nod. Längden av den ändliga grafen är a_1 . Funktionen för den halvändliga kanten kallar vi u , för att skilja de externa funktioner med de interna funktioner. Detta ger oss vektorerna

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} u_1(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_1(a_1) \end{pmatrix}, \vec{\psi}' = \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ \psi_1'(0) \\ -\psi_1'(a_1) \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Nu ska vi försöka skriva matriserna A och B , som är 3×3 matriser, med standardvillkor. Därmed får vi

$$\begin{cases} u_1(0) = \psi_1(0) = \psi_1(a_1) \\ \Sigma \vec{\psi}' = u_1'(0) + \psi_1'(0) - \psi_1'(a_1) = 0 \end{cases}$$

Enligt *Sats 5.1* måste ekvationen $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0$ uppfyllas. Genom att sätta vektorerna (9) i ekvationen så får vi

$$A \begin{pmatrix} u_1(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_1(a_1) \end{pmatrix} + B \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ \psi_1'(0) \\ -\psi_1'(a_1) \end{pmatrix}.$$

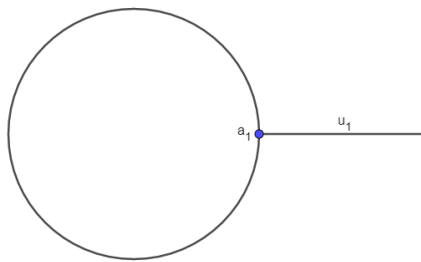
Matriserna får vi fram genom att fylla in med 1 eller -1 för att standardvillkoren ska gälla. Gör vi detta så kan man skriva matriserna som

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \text{ och } B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nu när vi har skrivit matriserna A och B med standardvillkoren så ska vi kolla om de är så kallade Nevanlinna par. Detta gör vi genom att kolla om $AB^* = BA^*$ och $\text{rank}(A, B) = 3$ uppfylls. Det vi får är att $AB^* = 0 = BA^*$ och att block matrisen (A, B) har en maximal rang på 3 och därmed är Nevanlinna par. För att bestämma antalet negativa egenvärden för lasso grafen nu så behöver vi matrisen M_0 . Eftersom vi enbart har en nod så medför det att $M_{I,0} = m_{1,0}$ och att

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/a_1 & 1/a_1 \\ 0 & 1/a_1 & -1/a_1 \end{pmatrix},$$

där första nolla i M_0 är 1×1 matrisen $0_{|\varepsilon|}$. Därmed får vi att $AB^* + BM_0B^* = 0$ och lasso grafen har inga positiva egenvärden och därmed har avbildningen inga negativa egenvärden enligt sats 5.1. Sylvesterkriteriet behövs inte kontrolleras då vi får direkt att den resulterade matrisen är noll.



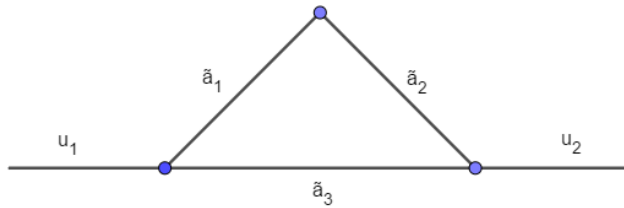
Figur 5.1: Lasso grafen med en nod och två kanter.

Nu har vi enbart applicerat standardvillkor på grafen. Senare kommer vi applicera andra villkor på en av noderna i kvantgraferna och då kommer vi märka att det blir snabbt mer komplicerat och att matriserna blir mycket större, men tankesättet är lika.

5.4 Kvantgraf med flera noder

I avsnitt 5.2 visade vi att en lasso graf inte hade några negativa egenvärden för standardvillkoren. Om vi ritar upp en ny kvantgraf i formen av en triangel med två halvändliga kanter, Figur 5.2, så kan vi undersöka den. Vektorerna från (8) för ekvationen $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0$ blir

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} u_1(0) \\ u_2(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_1(\tilde{a}_1) \\ \psi_2(0) \\ \psi_2(\tilde{a}_2) \\ \psi_3(0) \\ \psi_3(\tilde{a}_3) \end{pmatrix}, \vec{\psi}' = \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ u_2'(0) \\ \psi_1'(0) \\ -\psi_1'(\tilde{a}_1) \\ \psi_2'(0) \\ -\psi_2'(\tilde{a}_2) \\ \psi_3'(0) \\ -\psi_3'(\tilde{a}_3) \end{pmatrix}. \quad (10)$$



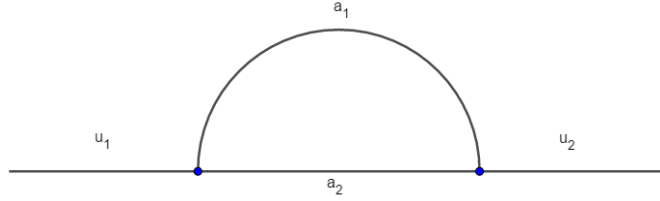
Figur 5.2: Triangel kvantgrafen med tre ändliga intervall och två halvändliga.

Återigen använder vi oss av standardvillkoren för att skriva matriserna A och B . Detta betyder att vi får tre olika villkor för respektive nod. Men vi börjar kolla för villkoret i nod 3, toppen av triangeln

$$\begin{cases} \psi_1(\tilde{a}_1) = \psi_2(0) \\ \Sigma\vec{\psi}' = \psi_2'(0) - \psi_1'(\tilde{a}_1) = 0 \end{cases}.$$

Standardvillkoren för nod 3 säger att funktionsvärdena är lika och även derivatorna har samma värde. Detta betyder att villkoren för nod 3 inte behöver räknas med för matriserna A och B och kvantgrafan kan ritas om till Figur 5.3 och vektorerna (10) blir då

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} u_1(0) \\ u_2(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_1(a_1) \\ \psi_2(0) \\ \psi_2(a_2) \end{pmatrix}, \vec{\psi}' = \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ u_2'(0) \\ \psi_1'(0) \\ -\psi_1'(a_1) \\ \psi_2'(0) \\ -\psi_2'(a_2) \end{pmatrix}. \quad (11)$$



Figur 5.3: Triangel kvantgrafen med två ändliga intervall och två halvändliga.

Sambandet mellan de första noderna och de andra blir då att kanten \tilde{a}_3 ges nu av a_2 och kanterna \tilde{a}_1 och \tilde{a}_2 ges nu av a_1 . Villkoren för de nya noderna som är kvar blir då

$$\text{Nod 1 : } \begin{cases} u_1(0) = \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \Sigma \vec{\psi}' = u_1'(0) + \psi_1'(0) - \psi_2'(0) = 0 \end{cases} ,$$

$$\text{Nod 2 : } \begin{cases} u_2(0) = \psi_1(a_1) = \psi_2(a_2) \\ \Sigma \vec{\psi}' = u_2'(0) - \psi_1'(a_1) - \psi_2'(a_2) = 0 \end{cases}$$

För att skriva matriserna A och B så kan vi göra det för respektive villkor först vilket kommer ge oss två 3×3 matriser, en för A och en för B . Därefter kan man sätta ihop A -matriserna för båda villkoren och samma för B -matriserna vilket kommer ge 6×6 matriser. De stora matriserna A och B kommer ha samma bas som matrisen M_0 . De 3×3 matriserna som vi ska skriva med standardvillkoren uppfyller följande ekvationer

$$A_1 \begin{pmatrix} u_1(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \end{pmatrix} + B_1 \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ \psi_1'(0) \\ \psi_2'(0) \end{pmatrix} = 0, \quad (12)$$

$$A_2 \begin{pmatrix} u_2(0) \\ \psi_1(a_1) \\ \psi_2(a_2) \end{pmatrix} + B_2 \begin{pmatrix} u_2'(0) \\ -\psi_1'(a_1) \\ -\psi_2'(a_2) \end{pmatrix} = 0. \quad (13)$$

Matriserna A_1 och A_2 är likadana, samma gäller för B_1 och B_2 , och de är

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, B_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Matriserna får vi fram på liknande sätt som vi gjorde för lasso grafen. De stora

6×6 matriserna för A och B till ekvationen $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0$ blir

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ och } B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

När vi sätter ihop de små A -matriserna, respektive små B -matriserna, till de stora så kollar vi på villkoren för noderna och vilken position funktionsvärdena har i vektorerna (11). Så om vi kollar på nod 1 så har funktionsvärdena för dess vektorer i (12) position 1, 3 och 5. Det betyder att kolonnerna i A_1 blir kolonn positionerna 1, 3 och 5 i A , på överhalvan. Nod 2, vektorn (13), har funktionsvärdena på position 2, 4 och 6 och därmed lägger vi kolonnerna från A_2 på kolonn positionerna 2, 4 och 6 i A , på den nedrehalvan. På liknande sätt gör vi för B . Detta rekommenderas att läsaren gör själv för att få en bra förståelse om hur man skriver A och B med samma bas som M_0 .

Nu när vi har skrivit matriserna A och B är nästa steg att bestämma matrisen M_0 . För att bestämma den så måste först $M_{I,0}$ bestämmas.

$$M_{I,0} = \begin{pmatrix} m_{1,0} & 0 \\ 0 & m_{2,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1/a_1 & 1/a_1 & 0 & 0 \\ 1/a_1 & -1/a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/a_2 & 1/a_2 \\ 0 & 0 & 1/a_2 & -1/a_2 \end{pmatrix}$$

och M_0 blir då

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0_{|2 \times 2|} & 0 \\ 0 & M_{I,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/a_1 & 1/a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a_1 & -1/a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/a_2 & 1/a_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/a_2 & -1/a_2 \end{pmatrix}.$$

Enligt *Sats 5.1* måste vi beräkna matrisen $AB^* + BM_0B^*$, som vi kallar för R . Detta betyder att R blir

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/a_1 & 0 & 0 & 1/a_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a_1 & 0 & 0 & -1/a_1 \end{pmatrix} \sim \frac{1}{a_1} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Nu kan vi bestämma matrisens teckenkaraktär på två sätt. Vi börjar med att bestämma egenvärdena till den 2×2 -matrisen i det övre vänstra hörnet, eftersom resterande av matrisen är nollor som inte påverkar teckenkaraktären eller antalet positiva egenvärden. Den ger egenvärdena $-2/a_1$ och 0 vilket innebär att matrisen är negativt semidefinit. Om vi istället använder Sylvesterkriteriet på matrisen R så måste vi använda kriteriet på $-R$, eftersom Sylvester kriteriet kollar enbart om en matris är positivt definit eller positivt semidefinit. I början av avsnitt 5.2 så påpekade vi att R är negativt semidefinit om och endast om $-R$ är positivt semidefinit. Detta betyder att vi ska applicera Sylvester kriteriet på följande matris,

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_1} & -\frac{1}{a_1} \\ -\frac{1}{a_1} & \frac{1}{a_1} \end{pmatrix},$$

resterande av matrisen R är nollor och påpekar att den inte är definit. Detta ger oss tre determinanter med värdena $1/a_1, 0$ och $1/a_1$. Alla tre determinanter är större eller lika med 0 och därmed är $-R$ positivt semidefinit och medför att matrisen R är negativt semidefinit. Från sats 5.1 innebär detta att avbildningen $T_{A,B}$ inte har några negativa egenvärden.

6 Parametrisering

För större kvantgrafer och andra nodvillkor än standardvillkoren kan det bli väldigt jobbigt att arbeta med matriserna A och B . Ju större matriserna blir desto svårare blir det att kolla om A och B är Nevanlinna par. Därför ska vi introducera en parametrisering som gör att vi går från två matriser, A och B , med två villkor till en unitär matris S . En unitär matris är en matris vars konjugerade transponat även är dess invers, det vill säga $SS^* = S^*S = I$.

Parametrisering kan vi se från två olika riktningar. Första riktningen är om vi har en unitär matris S så kan vi skriva den som ett par matriser, A och B som är Nevanlinna par. Andra riktningen är åt andra hållet, om vi har ett par matriser, A och B , som är Nevanlinna par så existerar det en unitär matris S som vi kan parametrisera med. Båda riktningarna medför att

$$A\vec{y} + B\vec{y}' = 0 \Leftrightarrow i(S - I)\vec{y} + (S + I)\vec{y}' = 0$$

där parametriseringen som vi inför är

$$A = i(S - I) \text{ och } B = (S + I) \tag{14}$$

[4]

6.1 Bevis av parametriseringen

Vi måste bevisa att det går att parametrisera på detta sätt. Vi kollar först att om vi har den unitära matrisen S så kan man skriva den som A och B , som är Nevanlinna par och man kan använda sig av (14), det vill säga första riktningen som nämndes ovan. För att visa att $\text{rank}(A, B) = d$ visar vi att det enbart

finns en trivial vektor till dess nollrum. Vi vet att $\text{ran}(A, B)$ är en delmängd av det komplexa rummet av n dimensioner, \mathbb{C}^n . Detta betyder att dess ortogonala komplement är lika med nollrummet av matrisernas konjugerade transponat, det vill säga

$$(\text{ran}(A, B))^\perp = \ker \begin{pmatrix} A^* \\ B^* \end{pmatrix}. \quad (15)$$

För att visa att nollrummet från identiteten (15) enbart har det triviala elementet $x = 0$ så använder vi parametreringen till $A^*x = 0$ och $B^*x = 0$, där $x \in \mathbb{C}^n$. Detta ger oss att

$$\begin{cases} A^*x = i(S^* - I)x = 0 \Rightarrow iS^*x = iIx \\ B^*x = (S^* + I)x = 0 \Rightarrow S^*x = -Ix \end{cases}.$$

Detta betyder att nollrummet enbart har den triviala lösningen $x = 0$. Att kolla om $AB^* = BA^*$ uppfylls är mycket enklare. Vi ersätter A och B med parametreringen, multiplicerar parenteserna och använder oss av att $SS^* = I$.

Nu måste vi bevisa andra riktningen, det vill säga om man har A och B och vill finna matrisen S . Detta betyder att vi måste definiera S med avseende på A och B . Vi använder oss av $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0$ från *Sats 5.1* och antar att B är inverterbar. Detta betyder att vi kan lösa ut $\vec{\psi}'$ enligt

$$A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0 \Rightarrow \vec{\psi}' = -B^{-1}A\vec{\psi}.$$

Om det existerar en unitär matris S så måste den uppfylla följande $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = i(S - I)\vec{\psi} + (S + I)\vec{\psi}' = 0$. Vi fortsätter med att ersätta $\vec{\psi}'$ med det som vi har löst ut enligt

$$i(S - I)\vec{\psi} + (S + I)\vec{\psi}' = 0 \Rightarrow i(S - I)\vec{\psi} - (S + I)B^{-1}A\vec{\psi} = 0 \quad (16)$$

Nu behöver vi enbart kolla på matriserna i (16) då vi vill bestämma S , så vi kan bortse från vektorerna och lösa ut S enligt

$$\begin{aligned} i(S - I) - (S + I)B^{-1}A &= 0 \\ S(i - B^{-1}A) &= i + B^{-1}A \\ S &= (i + B^{-1}A)(i - B^{-1}A)^{-1} = (B^{-1}(iB - A))^{-1}(B^{-1}(iB + A)) \\ S &= (iB - A)^{-1}(iB + A). \end{aligned}$$

Vi får att den matrisen S är

$$S = (iB - A)^{-1}(iB + A). \quad (17)$$

Nu ska vi visa att ekvation (17) är sann även då B inte är inverterbar. Detta gör vi genom att visa tre delar:

- $iB - A$ är inverterbar
- S är en unitär matris

- $i(S - I)\vec{\psi} + (S + I)\vec{\psi}' = 0$ uppfylls.

Nu när vi ska bevisa första och andra villkoret för S så följer vi stegen från [4]. Matrisen $(iB - A)$ är inverterbar, annars skulle det finnas en icke-trivial lösning till nollrummet av matrisen $-(A^* + iB^*)$. Detta betyder att för $(A^* + iB^*)x = 0$ existerar något $x \in \mathbb{C}^n$, men $x \neq 0$. Vi skriver om $(A^* + iB^*)x = 0$ till $A^*x = -iB^*x$, följt av att multiplicera med A från vänster och sedan ta skalärprodukten som ger

$$\begin{aligned}\langle AA^*x, x \rangle &= -i\langle AB^*x, x \rangle \\ \langle A^*x, A^*x \rangle &= -i\langle AB^*x, x \rangle \\ \|A^*x\|^2 &= -i\langle AB^*x, x \rangle.\end{aligned}$$

Vi vet att vänsterledet är reellt eftersom det är normen så vi ska nu visa att skalärprodukten på högerledet är reellt.

$$\begin{aligned}\langle AB^*x, x \rangle &= \langle B^*x, A^*x \rangle = \langle x, BA^*x \rangle = \langle x, AB^*x \rangle \\ \langle AB^*x, x \rangle &= \overline{\langle AB^*x, x \rangle}\end{aligned}$$

Vi har använt att $\{A, B\}$ är Nevanlinna par gäller $AB^* = BA^*$ och visat att båda termerna är reella och därmed har vi att $A^*x = 0$. På likande sätt får vi

$$\langle BA^*x, x \rangle = -i\|B^*x\|^2$$

där $B^*x = 0$. Detta motsäger villkoret om $\text{rank}(A, B) = d$ och därmed är $(iB - A)$ verkligen inverterbar .

Att matrisen S är unitär innebär att $SS^* = I$ vilket vi bevisar genom följande,

$$\begin{aligned}SS^* &= (iB - A)^{-1}(iB + A)(-iB^* + A^*)(-iB^* - A^*)^{-1} \\ &= (iB - A)^{-1}(iB + A)(-iB^* + A^*)[(iB - A)(-iB^* - A^*)]^{-1}(iB - A) \\ &= (iB - A)^{-1}(iBA^* + BB^* + AA^* - iAB^*) \times \\ &\quad [BB^* - iBA^* + iAB^* + AA^*]^{-1}(iB - A) \\ &= I.\end{aligned}$$

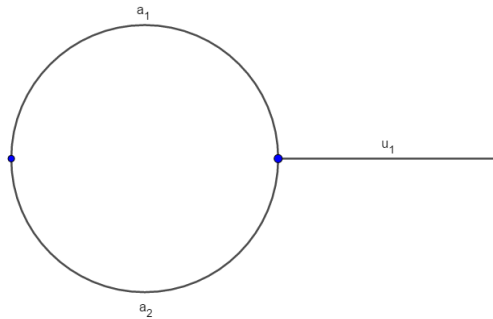
För att visa att $i(S - I)\vec{\psi} + (S + I)\vec{\psi}' = 0$ uppfylls så ska vi ersätta S med (17) och försöka få ekvationen på formen $A\vec{\psi} + B\vec{\psi}' = 0$. Detta betyder att vi får

$$\begin{aligned}i(S - I)\vec{\psi} + (S + I)\vec{\psi}' &= i((iB - A)^{-1}(iB + A) - I)\vec{\psi} + ((iB - A)^{-1}(iB + A) + I)\vec{\psi}' \\ &= (iB - A)^{-1}[(-B + Ai + B + Ai)\vec{\psi} + (iB + A + iB - A)\vec{\psi}'] \\ &= (iB - A)^{-1}[2iA\vec{\psi} + 2iB\vec{\psi}'] \\ &= 0 \\ 0 &= (iB - A)^{-1}[2iA\vec{\psi} + 2iB\vec{\psi}'] \\ 0 &= 2iA\vec{\psi} + 2iB\vec{\psi}' \\ 0 &= A\vec{\psi} + B\vec{\psi}'\end{aligned}$$

Där vi använder oss av att $(iB - A)$ är inverterbar. Nu är alla tre delar bevisade och parametriseringen i båda riktningarna är bevisad. \square

7 Exempel på en kvantgraf: Lasso grafen

Nu har vi gått igenom flera olika satser, definitioner och några exempel på hur man använder de. I detta avsnitt kommer vi återigen använda oss av en lasso graf men vi inför en ny punkt på den interna kanten, se Figur 7.1. På denna punkt kommer vi använda oss av en matris S , vars kolonn rum bildar en ortonormal bas.



Figur 7.1: Lasso graf med tre kanter och två noder.

Vektorerna för denna graf är då

$$\vec{\psi} = \begin{pmatrix} u_1(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_1(a_1) \\ \psi_2(0) \\ \psi_2(a_2) \end{pmatrix}, \vec{\psi}' = \begin{pmatrix} u_1'(0) \\ \psi_1'(0) \\ -\psi_1'(a_1) \\ \psi_2'(0) \\ -\psi_2'(a_2) \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Matrisen S som vi kommer använda är

$$S = \begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix}$$

där $\phi \in [0, 2\pi]$. För att göra beräkningarna enklare så skriver vi matrisen S på formen med A och B med parametriseringen från avsnitt 6,

$$\begin{aligned} A_1 &= i(S - I) = i \left(\begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = \\ &\quad \begin{pmatrix} i(\cos(\phi) - 1) & -i\sin(\phi) \\ i\sin(\phi) & i(\cos(\phi) - 1) \end{pmatrix} \\ B_1 &= S + I = \left(\begin{pmatrix} \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} (\cos(\phi) + 1) & -\sin(\phi) \\ \sin(\phi) & (\cos(\phi) + 1) \end{pmatrix}.$$

Vektorerna för denna nod är

$$\vec{\psi}_1 = \begin{pmatrix} \psi_1(a_1) \\ \psi_2(a_2) \end{pmatrix}, \vec{\psi}'_1 = \begin{pmatrix} -\psi'_1(a_1) \\ -\psi'_2(a_2) \end{pmatrix}.$$

Villkoren för andra punkten, där de interna kanterna möter den externa kanten bestäms med standardvillkor som är

$$\begin{cases} u_1(0) = \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \Sigma \vec{\psi}' = u'_1(0) - \psi'_1(0) - \psi'_2(0) = 0 \end{cases}$$

med vektorerna

$$\vec{\psi}_2 = \begin{pmatrix} u_1(0) \\ \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \end{pmatrix}, \vec{\psi}'_2 = \begin{pmatrix} u'_1(0) \\ \psi'_1(0) \\ \psi'_2(0) \end{pmatrix}.$$

Vi får då matriserna

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, B_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Detta ger oss de stora matriserna

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i(\cos(\phi) - 1) & 0 & -i \sin(\phi) \\ 0 & 0 & i \sin(\phi) & 0 & i(\cos(\phi) - 1) \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

och

$$B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & (\cos(\phi) + 1) & 0 & -\sin(\phi) \\ 0 & 0 & \sin(\phi) & 0 & (\cos(\phi) + 1) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Den symmetriska M_0 matrisen blir då

$$M_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1/a_1 & 1/a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a_1 & -1/a_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1/a_2 & 1/a_2 \\ 0 & 0 & 0 & 1/a_2 & -1/a_2 \end{pmatrix}$$

och den resulterade matrisen blir då

$$R = AB^* + BM_0B^* = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & r_{14} & r_{15} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & r_{24} & r_{25} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & r_{34} & r_{35} \\ r_{41} & r_{42} & r_{43} & r_{44} & r_{45} \\ r_{51} & r_{52} & r_{53} & r_{54} & r_{55} \end{pmatrix}.$$

Elementen i matrisen är så långa att de inte kommer få plats, därför skriver vi varje element som en lista nedanför. Elementen är förenklade så mycket som möjligt.

Rad 1:

- $r_{11} = [\frac{(\cos(\phi)+1)^2}{a_1} - \frac{\sin(\phi)^2}{a_2}]$
- $r_{12} = [\sin(\phi)(\cos(\phi) + 1)(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2}) - 2i \sin(\phi)]$
- $r_{13} = r_{14} = 0$
- $r_{15} = [\frac{\cos(\phi)+1}{a_1} - \frac{\sin(\phi)}{a_2}]$

Rad 2:

- $r_{21} = [\sin(\phi)(\cos(\phi) + 1)(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2}) + 2i \sin(\phi)]$
- $r_{22} = [\frac{\sin(\phi)^2}{a_1} - \frac{(\cos(\phi)+1)^2}{a_2}]$
- $r_{23} = r_{24} = 0$
- $r_{25} = [\frac{\sin(\phi)}{a_1} + \frac{\cos(\phi)+1}{a_2}]$

Rad 3 och 4 är nollor

Rad 5:

- $r_{51} = [\frac{\cos(\phi)+1}{a_1} - \frac{\sin(\phi)}{a_2}]$
- $r_{52} = [\frac{\cos(\phi)+1}{a_2} + \frac{\sin(\phi)}{a_1}]$
- $r_{53} = r_{54} = 0$
- $r_{55} = [-\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2}]$

Nu måste vi kolla vad matrisen R har för teckenkaraktär. Eftersom matrisen har två rader respektive kolonner som är nollor så kan vi ta bort dessa och gå från en 5×5 matris till en 3×3 matris. Detta gör att vi får matrisen \tilde{R} ,

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{15} \\ r_{21} & r_{22} & r_{25} \\ r_{51} & r_{52} & r_{55} \end{pmatrix}.$$

Vi börjar med att undersöka om matrisen $-\tilde{R}$ är positivt semidefinit eftersom det betyder att \tilde{R} är negativt semidefinit och avbildningen har inga negativa egenvärden, enligt sats 5.1. Detta gör vi genom att applicera Sylvester kriteriet på $-\tilde{R}$ vilket kommer ge sex olika determinanter. Determinanterna är följande:

$$\begin{aligned}
\det\tilde{R}_1 &= \det(-r_{11}) = \left[\frac{\sin(\phi)^2}{a_2} - \frac{(\cos(\phi) + 1)^2}{a_1} \right], \\
\det\tilde{R}_2 &= \det\left(-\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} \\ r_{21} & r_{22} \end{pmatrix}\right) = \\
&= [-4(\cos(\phi) + 1)(\cos(\phi) + a_1a_2 - a_1a_2 \cos(\phi) + 1) \frac{1}{a_1a_2}], \\
\det\tilde{R}_3 &= \det\left(-\begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{15} \\ r_{21} & r_{22} & r_{25} \\ r_{51} & r_{52} & r_{55} \end{pmatrix}\right) = \\
&= [-4(\cos(\phi) + 1)(2 \cos(\phi) + a_1a_2 + a_1^2 - a_1^2 \cos(\phi) - a_1a_2 \cos(\phi) + 2) \frac{1}{a_1^2a_2}], \\
\det\tilde{R}_4 &= \det(-r_{22}) = \left[\frac{(\cos(\phi) + 1)^2}{a_2} - \frac{\sin^2(\phi)}{a_1} \right], \\
\det\tilde{R}_5 &= \det(-r_{55}) = \left[\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} \right], \\
\det\tilde{R}_6 &= \det\left(-\begin{pmatrix} r_{22} & r_{25} \\ r_{52} & r_{55} \end{pmatrix}\right) = \\
&= [-2(\cos(\phi) + 1)(a_2 - a_1 \cos(\phi) - a_2 \cos(\phi) + a_1 \sin(\phi)) \frac{1}{a_1^2a_2}].
\end{aligned}$$

Nästan alla determinanter, förutom $\det\tilde{R}_5$, är beroende av $\phi \in [0, 2\pi]$. Om vi väljer $\phi = \pi$ så blir fem av determinanterna 0 medan $\det\tilde{R}_5 > 0$, eftersom a_1 och a_2 är större en noll. Detta betyder att matrisen $-\tilde{R}$ är positivt semidefinit och \tilde{R} är då negativt semidefinit och avbildningen $T_{A,B}$ har inga negativa egenvärden, enligt sats 5.1. Problemet med att ta $\phi = \pi$ är att om vi sätter in det i A_1 och B_1 matrisen för noden mellan de två interna kanterna så kommer det visa sig att nodvillkoret gäller då de inte är kopplade till varandra utan då där separerade och Figur 7.1 gäller inte då.

Om vi istället väljer $\phi = \frac{\pi}{2}$ och kollar nodvillkoret för noden där de två interna kanterna möts, det vill säga för vektorn $\vec{\psi}_1$ och $\vec{\psi}'_1$, så visar det sig att noderna verkligen är kopplade och vi får verkligen Figur 7.1. Det nya värdet på ϕ kommer medför en ny teckenkaraktär för matrisen \tilde{R} där matrisen är

$$\tilde{R} = \begin{pmatrix} \left(\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) & \left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} - 2i \right) & \left(\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) \\ \left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} + 2i \right) & \left(\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) & \left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} \right) \\ \left(\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) & \left(\frac{1}{a_1} + \frac{1}{a_2} \right) & \left(-\frac{1}{a_1} - \frac{1}{a_2} \right) \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} (C-D) & (C+D-2i) & (C-D) \\ (C+D+2i) & (C-D) & (C+D) \\ (C-D) & (C+D) & (-C-D) \end{pmatrix}.$$

Vi har satt $C = \frac{1}{a_1}$ och $D = \frac{1}{a_2}$ bara för att göra matrisen enklare att använda. Om vi beräknar determinanten för matrisen \tilde{R} så kommer vi få

$$\det \tilde{R} = 8C^2D + 4C + 4D.$$

Determinanten är strikt större än noll och eftersom determinanten är produkten av alla egenvärden så betyder det att vi kan ha två olika fall,

- Alla tre egenvärden är positiva,
- Ett egenvärde är positivt och två är negativa.

Elementet i nedre högre hörn i \tilde{R} är negativ och därmed kan inte alla egenvärden vara positiva, det vill säga matrisen kan inte vara positivt definit. Då får vi det andra fallet som gör att matrisen är indefinit eftersom det finns både positivt och negativt egenvärden och med ett positivt egenvärde så får vi att avbildningen $T_{A,B}$ har ett negativt egenvärde.

Självklart kan ϕ anta andra värden men genom att undersöka \tilde{R} för det mer allmänna fallet så kommer vi se att dess determinant kommer alltid vara positiv, eller noll i vissa fall. Eftersom det nedre högre elementet i \tilde{R} alltid är negativt så kommer teckenkaraktären vara indefinit, det vill säga ett positivt egenvärde och därmed har avbildningen alltid ett negativt egenvärde.

8 Avslutningsord

Syftet med arbetet var att bestämma antalet negativa egenvärden för olika kvantgrafer. Vi fick ju fram ett negativt egenvärde för avbildningen $T_{A,B}$ i exemplet i avsnitt 7 och ett negativt egenvärde för differentialekvationen på intervallet för Robinvillkoret. I exemplet från avsnitt 7 så visade vi även att avbildningen kommer för det mesta ha ett negativt egenvärde. Vi har för det mesta enbart gått igenom standardvillkor men även ett exempel där vi använder en unitär S -matris, vilket är väldigt grundläggande nodvillkor. Om vi skulle applicera det vi har gått igenom på mer "riktiga" kvantgrafer, grafer från kvantmekaniska objekt, där mer komplicerade nodvillkor krävs så skulle vi säkert få fram flera exempel där vi får negativa egenvärden.

9 Referenser

[1] Demirel Semra 2012 Spectral Theory of Quantum Graphs, Doktorsavhandling

[2] Császár G. Attila och Fábri Csaba 2018 Vibrational quantum graphs and their application to the quantum dynamics of CH_5^+ , *Phys.Chem.Chem.Phys.*, 2018, 20, 16913

[3] Norman L. Biggs 2004 Discrete mathematics, second edition

[4] Kurasov Pavel 2019 Quantum Graphs: Spectral theory and Inverse Problems. (Har ej publicerats vid denna tid, version från February 8 2019)

[5] Behrndt Jussi and Luger Annemarie 2010 On the number of negative eigenvalues of the Laplacian on a metric graph, 2010 J. Phys. A: Math. Theor. 43 474006

[6] https://en.wikipedia.org/wiki/Inner_product_space. 2019

[7] Böiers Lars-Christer and Persson Arne 2010 Analys i en variabel, upplaga 3:5

[8] https://en.wikipedia.org/wiki/Definiteness_of_a_matrix#Eigenvalues. 2019

[9] https://en.wikipedia.org/wiki/Sylvester%27s_criterion. 2019