Lineární a multilineární algebra

Téma 3: Unitární a ortogonální lineární operátory

Obsah tématu

1. Speciální operátory pro fyziku.
2. Unitární (ortogonální) lineární operátor v U_n (E_n).
3. Diagonální reprezentace unitárních operátorů.
4. Úlohy k procvičení.

Literatura: Matematika pro porozumění i praxi II/1, VUTIUM, Brno 2012 (kapitola 6, str. 161-174).

Speciální operátory pro fyziku

Již víckrát jsme si ukázali, že lineální algebra má zásadní význam pro fyziku v řadě situací. Předkládané téma se vztahuje i k těmto situacím. Budeme uvažovat o operátorech ve vektorových prostorech vybavených skalárním součinem, tj. v unitárních, resp. euklidovských prostorech nad $\mathbb{C}$, resp. nad $\mathbb{R}$. Vzhledem ke skalárnímu součinu, který představuje jakési „nadstandardní“ vybavení vektorového prostoru, jsme již dříve definovali speciální vlastnosti souborů vektorů – ortogonalitu a normovanost. Obdobně můžeme definovat také speciální vlastnosti lineárních operátorů v těchto prostorech. Jedním z typů lineárních operátorů užitečných ve fyzice jsou tzv. unitární operátory v U_n, resp. ortogonální operátory v E_n. Jsou to regulární operátory, často s významem souřadnicových transformací.

Unitární (ortogonální) operátor v U_n (E_n)

Začneme rovnou definicí. Uvažujme obecně o unitárním prostoru (nad $\mathbb{C}$), pojmy a výsledky týkající se euklidovského prostoru dostaneme záměnou komplexních čísel za reálná.

DEFINICE: Unitární a ortogonální operátor

Lineární operátor φ v U_n (resp. v E_n) se nazývá unitární, (resp. ortogonální), jestliže pro každé dva vektory $a, b \in U_n$, resp. $a, b \in E_n$ platí

$$(\varphi(a), \varphi(b)) = (a, b).$$

Tato vlastnost má jednoduchou geometrickou interpretaci: unitární, resp. ortogonální operátor zachovává skalární součin, tj. skalární součin obrazů je shodný se skalárním součinem vzorů.

Reprezentace unitárního (ortogonálního) operátoru v bázích

Speciální vlastnost operátoru jistě povede k nějaké speciální vlastnosti jeho reprezentující matice. Název napovídá, že by mohlo jít o unitární, resp. ortogonální matici. Ale v jaké bázi? Zkusme zapsat definiční vztah pro operátor v ONB pro U_n:

$$a,\, b \in U_n, \quad a \ldots (\alpha),\;\; b \ldots (\beta) \quad \text{v ONB} \quad (e_1,\, \ldots,\, e_n),$$

$$\varphi(a) \ldots (\tilde{\alpha}),\;\; \varphi(\beta) \ldots (\tilde{\beta}) \;\text{ v téže ONB},\;\; \tilde{\alpha} = (\alpha)A, \quad \tilde{\beta} = (\beta)A,$$

kde A je matice operátoru φ ve zvolené ONB. Platí (počítejte)

$$(\varphi(a),\, \varphi(b)) = (a,\, b) \implies (\tilde{\alpha})(\tilde{\beta})^{T*} = (\alpha)(\beta)^{T*},$$

$$(\alpha)A((\beta)A)^{T*} = (\alpha)AA^{T*}(\beta)^{T*} = (\alpha)(\beta)^{T*} \implies$$

$$\implies (\alpha)(AA^{T*} - E)(\beta)^{T*} = 0 \;\text{ pro lib. } a,\, b \in U_n$$

Jak máme interpretovat poslední vztah na předchozím snímku? Každého jistě hned napadne, že zařídit jeho platnost pro libovolné n-tice (α) a (β) nelze jinak, než že je nulová matice $AA^{T*} - E$. Nápad ale není důkaz, takže postupujme pečlivěji. Volme postupně $(\alpha) = (0, \ldots, 1^i, \ldots, 0)$, $(\beta) = (0, \ldots, 1^j, \ldots, 0)$, $1 \le i, j \le n$, tj. n-tice (α) má na i-té pozici jedničku, jinde nuly, obdobně n-tice (β). Provedeme-li pro tyto n-tice maticové násobení $(\alpha)M(\beta)^{T*}$ pro matici $M = (\mu^k_\ell)$, $1 \le k, \ell \le n$, dostaneme matici typu $1/1$ s prvkem μ^i_j. Platí-li $(\alpha)M(\beta)^{T*} = 0$ pro všechny speciální n-tice uvedeného typu (a tedy pro libovolné n-tice) je $\mu^i_j = 0 \Rightarrow M = 0$. V případě reprezentující matice unitárního operátoru je $M = AA^{T*} - E = 0$, odtud $AA^{T*} = E$. Matice (A^{T*} je inverzní maticí k matici A).

VĚTA: Reprezentace unitárního, resp. ortogonálního operátoru

Unitární (ortogonální) operátor je v každé ONB reprezentován unitární (ortogonální) maticí, tj. $A^{-1} = A^{T*}$ ($A^{-1} = A^{T}$).

Pozor! Ortonormálnost báze je důležitá! A co si myslíte o platnosti následujícího tvrzení?

VĚTA: Lineární operátor φ v U_n (resp. v E_n) je unitární (resp. ortogonální) právě když je alespoň v jedné ortonormální bázi reprezentován unitární (ortogonální) maticí.

Tato věta opravdu platí. V předchozích úvahách jsme dokázali, že unitární (ortogonální) operátor je reprezentován unitární (ortogonální) maticí dokonce v libovolné ortonormální bázi. A teď obráceně: Předpokládejme, že operátor φ v U_n je v jisté ONB $(e_1, \ldots, e_n)$ reprezentován unitární maticí. Uměli byste zdůvodnit, že tento operátor je unitární (vlastnost nezávislá na bázi)?

POZNÁMKA: Unitárnost $\Longrightarrow$ regularita

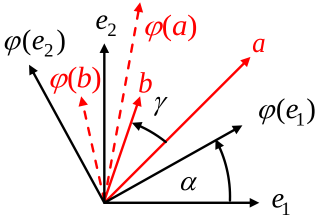
Všimli jste si, že unitární (ortogonální) matice je regulární? Unitární (ortogonální) lineární operátor je tedy regulární. Co dokážete říct o jeho jádru $\operatorname{Ker}\varphi$ a obrazu $\operatorname{Im}\varphi$?

PŘÍKLAD: Otočení v rovině E_2

V euklidovské rovině umíme měřit délky úseček a úhly mezi nimi. Uvažujme o dvojrozměrném vektorovém prostoru E_2 (nad $\mathbb{R}$) tzv. volných vektorů, tj. množin všech orientovaných úseček v euklidovské rovině, lišících se umístěním. (Sčítání vektorů je definováno standardně pomocí vektorového rovnoběžníka, násobení skalárem znamená vynásobení délky a zachování směru, pro kladný, resp. záporný skalár se zachová orientace, resp. změní se na opačnou).

Skalární součin libovolných dvou vektorů a, $b \in E_2$ je definován vztahem $(a,\, b) = |a| \cdot |b| \cdot \cos\gamma$, kde γ je úhel, který tyto vektory svírají.

Lineární operátor φ provede s každým vektorem otočení o daný úhel α.



$$\varphi(e_1) = e_1 \cos\alpha + e_2 \sin\alpha$$
$$\varphi(e_2) = -e_1 \sin\alpha + e_2 \cos\alpha$$

$$A = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

Z elementární geometrie víme, že při otočení v rovině se zachovávají velikosti i úhly, takže ani skalární součin libovolných dvou vektorů se nezmění. Otočení je tedy ortogonálním operátorem. V libovolné ONB (e_1, e_2) jej reprezentuje matice A, která je ortogonální (ověřte to výpočtem inverzní matice nebo pomocí relací ortogonality).

Diagonální reprezentace unitárních operátorů

V tomto odstavci uvidíme, že unitární operátory (v U_n nad $\mathbb{C}$) mají vždy diagonální reprezentaci. Jejich specifické vlastnosti totiž zajišťují existenci bází tvořených jejich vlastními vektory.

Vlastní hodnoty unitárního operátoru

Předpokládejme, že $a \in U_n$ je vlastní vektor unitárního operátoru $\varphi : U_n \to U_n$ příslušný vlastní hodnotě λ. Platí $\varphi(a) = \lambda a$. Z definice unitárního operátoru dostaneme $(\varphi(a), \varphi(a)) = (a, a)$, tj.

$$(\lambda a, \lambda a) = \lambda\lambda^*(a, a) = (a, a) \implies |\lambda|^2 = 1.$$

Vlastními hodnotami unitárního operátoru jsou tedy určité komplexní jednotky. Jsou tvaru $\lambda = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, $\alpha \in [0, 2\pi)$.

Vlastnosti vlastních vektorů unitárního operátoru

Dejme tomu, že a, resp. b je libovolný z vlastních vektorů příslušných vlastní hodnotě $\lambda_a = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$, resp. $\lambda_b = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}$, $\lambda_a \neq \lambda_b$, tj. $\varphi(a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} a$, $\varphi(b) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} b$. Tak počítejte:

$$(\varphi(a),\, \varphi(b)) = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} a,\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta} b) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)}(a,\, b).$$

Z definice unitárního operátoru, $(\varphi(a),\, \varphi(b)) = (a,\, b)$, plyne $(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)} - 1)(a,\, b) = 0$, ale $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha-\beta)} - 1 \neq 0$, neboť $\alpha \neq \beta$. Pak musí být $(a,\, b) = 0$, takže vektory a a b jsou ortogonální.

V případě vektorového prostoru nad $\mathbb{R}$ znamená rovnost $|\lambda|^2 = 1$ jen dvě možné vlastní hodnoty ortogonálního operátoru, $\lambda = \pm 1$. Pro E_2 jsou možnosti: $\lambda_1 = \lambda_2 = 1$, resp. $\lambda_1 = \lambda_2 = -1$ (otočení o úhel $\alpha = 0$, resp. $\alpha = \pi$), a dále $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -1$ (zrcadlení).

Diagonalizace unitárního operátoru

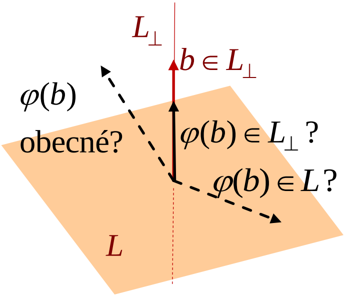
Označme $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ navzájem různé vlastní hodnoty (jsou to komplexní jednotky) unitárního operátoru φ a $L_1, \ldots, L_r$ jim odpovídající podprostory vlastních vektorů. Tyto podprostory jsou navzájem ortogonální, jak jsme dokázali. Jejich dimenze označme $q_1, \ldots, q_r$, kde $q_1 + \cdots + q_r = k \leq n$. Předpokládejme ostrou nerovnost. Dokážeme, že to vede ke sporu. Všechny vlastní vektory operátoru φ leží v podprostoru $L = L_1 \dot{+} \cdots \dot{+} L_r$. Označme dále $(f_1, \ldots, f_k)$ ONB v L tvořenou vlastními vektory operátoru a $(f_{k+1}, \ldots, f_n)$ ONB v ortogonálním doplňku $L_\perp$. V ONB $(f_1, \ldots, f_n)$ v U_n je operátor reprezentován blokovou maticí (uvidíme za chvíli)

$$A = \left(\begin{array}{c|c} D & 0 \\ \hline 0 & B \end{array}\right).$$

D je diagonální matice typu k/k (v diagonále je hodnota λ_s obsažena q_s-krát), B je unitární matice typu $n-k/n-k$.

Abychom se přesvědčili o tvaru matice A, zjistíme, jak operátor φ zobrazí vektor $b \in L_\perp$.

OTÁZKA: Co myslíte? Padne takový obraz do L, nebo zpět do $L_\perp$? Nebo to bude obecný vektor, který bude součtem svých ortogonálních průmětů do L a $L_\perp$? Zkuste to vymyslet a terpve pak se podívejte dál.



$a \in L \Rightarrow a = a_1 + \cdots + a_r\,,\ \ a_s \in L_s\,,$

$b \in L_\perp \Rightarrow (a\,,b) = 0$

$\varphi(a) = \varphi(a_1) + \cdots + \varphi(a_r) = \lambda_1 a_1 + \cdots + \lambda_r a_r \in L$

1) φ je regulární, proto obrazy $\varphi(a)$ vyplní L

2) $(\varphi(a), \varphi(b)) = (a\,,b) = 0$

z 1) a 2) plyne $\varphi(\mathrm{b}) \in L_\perp$

Operátor φ zobrazí vektory z $L_\perp$ zpět do $L_\perp$. Je to důsledkem toho, že unitární operátor je regulární a zachovává skalární součin.

Dokázali jsme tvar matice A a nyní pokračujeme v důkazu sporem:

Víme, že charakteristický polynom operátoru je stejný ve všech bázích a má tvar $(-1)^n(\lambda-\lambda_1)^{k_1}\cdots(\lambda-\lambda_r)^{k_r}$, k_s, $1 \leq s \leq r$, jsou násobnosti kořenů. (V případě prostoru nad $\mathbb{C}$, který je nyní ve hře, jsou vlastními hodnotami právě charakteristické kořeny.) Platí tak

$$(-1)^n(\lambda-\lambda_1)^{k_1}\cdots(\lambda-\lambda_r)^{k_r} = \det(D-\lambda E)\cdot\det(B-\lambda E) =$$

$$= (-1)^k(\lambda-\lambda_1)^{q_1}\cdots(\lambda-\lambda_r)^{q_r}\cdot\det(B-\lambda E).$$

Polynom $\det(B-\lambda E)$ má tedy charakteristické kořeny $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$, s násobnostmi $k_s - q_s$. $L_\perp$ proto obsahuje vždy přinejmenším jednorozměrný podprostor vlastních vektorů (po doplnění nulou) příslušný té hodnotě λ_s, pro kterou je $k_s - q_s \neq 0$. A to je ten spor – předpokládali jsme totiž, že všechny vlastní vektory leží v L.

Důsledek sporu: $L_\perp = \{0_{U_n}\}$, $\dim L_s = k_s$, $1 \leq s \leq r$.

Když teď shrneme výsledky sice jednoduchých, ale tak trochu obsáhlých úvah o problému vlastních hodnot a vektorů unitárního operátoru, dostaneme důležitou větu.

VĚTA: O diagonální reprezentaci unitárního operátoru

Nechť $\varphi : U_n \to U_n$ je unitární operátor, $\lambda_1, \dots, \lambda_r$ jeho navzájem různé charakteristické kořeny (tj. vlastní hodnoty), $k_1, \dots, k_r$ jejich násobnosti, $L_1, \dots, L_r$ jim příslušné podprostory vlastních vektorů (po doplnění nuly) o dimenzích $q_1, \dots, q_r$. Pak:

- Všechny vlastní hodnoty jsou komplexní jednotky.
- Vektorové podprostory $L_1, \dots, L_r$ jsou navzájem ortogonální.
- Platí $q_s = k_s$, $1 \le s \le r$, a $L_1 \dot{+} + \cdots \dot{+} L_r = U_n$.
- Operátor je v každé bázi svých vlastních vektorů reprezentován diagonální maticí D, přičemž každá z vlastních hodnot vystupuje v diagonále tolikrát, kolik je její násobnost.

POZNÁMKA: Víte co znamená vyjádření, že dva vektorové podprostory jsou navzájem ortogonální? Je to stejné, jako když jsou ortogonální L a $L_\perp$. Podprostory $L_1, L_2 \subset U_n$ se nazývají ortogonální, je-li $(a_1, a_2) = 0$ pro libovolné $a_1 \in L_1$ a $a_2 \in L_2$.

PÁR OTÁZEK: Zkuste odpovědět a zdůvodnit, teprve pak přejděte na další stránku:

- Které části věty o diagonalizaci unitárního operátoru obecně platí/neplatí pro ortogonální operátor (v E_n nad $\mathbb{R}$)?
- Může se stát, že unitární operátor (v U_n nad $\mathbb{C}$) nemá žádné vlastní vektory? Pokud se to stát může, uveďte příklad.
- Může se stát, že ortogonální operátor (v E_n nad $\mathbb{R}$) nemá žádné vlastní vektory? Pokud se to stát může, uveďte příklad.
- Je pravda, že ortogonální operátor (v E_n nad $\mathbb{R}$) nelze nikdy reprezentovat diagonální maticí? Není-li to pravda, uveďte příklad.
- Musí být báze, v níž je operátor reprezentován diagonální maticí, zásadně ortonormální?

PÁR ODPOVĚDÍ: Odpovědi na snadné otázky jsou snadné.

- První vlastnost platí v následujícím smyslu: pokud má ortogonální operátor nějaké reálné charakteristické kořeny, je to ± 1. Druhá vlastnost platí. Třetí a čtvrtá vlastnost platí jen v případě, že všechny charakteristické kořeny operátoru jsou reálné.
- Aby unitární operátor (v U_n nad $\mathbb{C}$) neměl žádné vlastní vektory se stát nemůže – dokázali jsme, že z nich lze vždy utvořit bázi.
- Může se stát, že ortogonální operátor (v E_n nad $\mathbb{R}$) skutečně nemá žádné vlastní vektory. Příkladem je třeba otočení v E_2 (viz výše).
- Není to pravda. Má-li ortogonální operátor reálné vlastní hodnoty (mohou to být pouze hodnoty 1, nebo -1 s různými násobnostmi), lze jej vždy reprezentovat diagonální maticí.
- Nemusí. Operátor je reprezentován diagonální maticí v každé bázi tvořené jeho vlastními vektory. (To platí pro jakýkoli lineární operátor, z jehož vlastních vektorů lze utvořit v daném prostoru bázi a dokonce v tom prostoru ani nemusí být zaveden skalární součin.)

Úlohy k procvičení

V následujících dvou úlohách pracujeme v prostorech se skalárním součinem $(a, b) = |a| \cdot |b| \cos\vartheta$, kde ϑ je úhel mezi vektory a a b a $|a|$, $|b|$ jsou jejich délky.

- Najděte diagonální reprezentaci operátoru „otočení“ v unitárním prostoru U_2 o obecný úhel α (matice operátoru je na snímku 9). Nejprve určete vlastní hodnoty a vlastní vektory (nad $\mathbb{C}$).
- Sestavte matici operátoru φ otočení v E_3 (převádí ortonormální bázi (e_1, e_2, e_3) opět v ortonormální bázi $(\varphi(e_1), \varphi(e_2), \varphi(e_3))$. (Ortonormální báze je tvořena jednotkovými vektory navzájem kolmými, tj. svírajícími 90°.) Směrové úhly otočení jsou α_{ij} (úhel mezi e_i a $\varphi(e_j)$.) Jsou všechny směrové úhly nezávislé? Pokud ne, uveďte vztahy mezi nimi. Je operátor φ ortogonální? Řešte otázku jeho diagonální reprezentace.

Další dvě úlohy jsou obecnější.

- Operátor φ v U_4 je v ONB (e_1, e_2, e_3, e_4) reprezentován maticí

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

  Rozhodněte, zda se jedná o unitátní operátor.

- Lineární operátory φ a ψ v U_n jsou unitární. Zjistěte, zda operátory $\varphi + \psi$ a $\alpha\varphi$, kde $\alpha \in \mathbb{C}$, a $\varphi \circ \psi$ jsou také unitární. Pokud zjistíte, že v případě některého z uvedených operátorů tomu tak obecně není, stanovte podmínky pro to, aby vlastnost unitárnosti byla splněna.

- Unitární, resp. ortogonální operátor jsme definovali podmínkou $(\varphi(a), \varphi(b)) = (a, b)$ pro libovolné $a, b \in U_n$, resp. $a, b \in U_n$. Je definiční podmínka $(\varphi(a), \varphi(a)) = (a, a)$ pro libovolné $a \in U_n$, resp. $a \in E_n$ ekvivalentní?

Výsledky:

- $\lambda_1 = \cos\alpha \pm \mathrm{i}\sin\alpha$, $L_1 = \left[| \left(-\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) | \right]$, $L_2 = \left[| \left(\frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}} \right) | \right]$.
- $A = (\cos\alpha_{ij})$, platí $\sum_{k=1}^{3} \cos\alpha_{ik} \cos\alpha_{jk} = \delta_{ij}$, $1 \leq i, j \leq 3$. Operátor je ortogonální.
- Pro operátor platí $A^{-1} = A^{T*}$, jedná se o unitární operátor. Lze také ověřit relace ortogonality: $A = (\alpha^i_j)$, $\alpha^k_j \alpha^{i*}_k = \delta^i_j$, $1 \leq i, j \leq 4$, sčítá se přes k (Einsteinova symbolika).
- Operátor $\varphi + \psi$ není unitární, operátory $\varphi \circ \psi$ a $\psi \circ \varphi$ jsou unitární, operátor $\alpha\varphi$ je unitární právě tehdy, je-li $\alpha\alpha^* = 1$.
- Aplikací vztahu $(\varphi(a), \varphi(a)) = (a, a)$ pro libovolný vektor z U_n na vektor $a + b$ zjistíme, že se jedná o ekvivalentní definici pouze v případě ortogonálního operátoru v E_n (nad $\mathbb{R}$), neboť zde platí $(a, b) = (b, a)$, na rozdíl od U_n (nad $\mathbb{C}$), kde je $(a, b) = (b, a)^*$.