

ЭРМИТОВЫ ПРОСТРАНСТВА И ОПЕРАТОРЫ НА НИХ

А. П. Ульянов

Версия от 21 апреля 2010 г.

Стратегия: от линейной алгебры к линейной геометрии

Перечислим сперва пространства, уже немного изученные в этом курсе, начиная с осени.

1. Трёхмерное пространство $\mathbb{R}^3$ вместе с его геометрией. Важнейшее понятие тут — скалярное произведение векторов, дающее удобные формулы для вычисления расстояний и углов.
2. Пространство столбцов $\mathbb{R}^n$. Всё, что мы прежде делали со столбцами, относилось к линейной алгебре, но без скалярного произведения не содержало почти никакой геометрии.
3. Абстрактное, данное набором аксиом, понятие вещественного линейного пространства. Приводились примеры: пространства многочленов или иных функций, пространства матриц. Опять же, никакой геометрии.

Теперь наша цель — многомерная линейная геометрия, что можно расшифровать как изучение пространств со скалярным произведением. Новые структуры будем вводить постепенно.

1. Стандартное скалярное произведение на $\mathbb{R}^n$.
2. Стандартное **комплексное** скалярное произведение на $\mathbb{C}^n$.
3. Абстрактное, данное набором аксиом, понятие вещественного или комплексного скалярного произведения. Нестандартное произведение бывает полезным и на пространстве столбцов, а особенно на его подпространствах. Будут также примеры скалярных произведений на пространствах функций и матриц.

Познакомившись с основными геометрическими свойствами (конечномерных) пространств со скалярным произведением, мы займёмся линейными операторами на них.

Стандартное эвклидово пространство

Ортонормированные базисы $\mathbb{R}^n$ и ортогональные матрицы

В привычном трёхмерном пространстве скалярное произведение векторов удобно вычислять по их координатам в стандартном базисе: для $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$ и $\mathbf{y} = y_1\mathbf{e}_1 + y_2\mathbf{e}_2 + y_3\mathbf{e}_3$ находим

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{X}^\top \mathbf{Y} = x_1y_1 + x_2y_2 + x_3y_3.$$

Введём **по аналогии** на пространстве столбцов $\mathbb{R}^n$ стандартное скалярное произведение

$$(X, Y) = \mathbf{X}^\top \mathbf{Y} = x_1y_1 + \dots + x_ny_n.$$

Обозначение с точкой не используется, обычно пишут круглые или угловые скобки.

Определение. Базис $\{X_1, \dots, X_n\}$ называют **ортонормированным**, или кратко **ОНБ**, если все векторы в нём **ортогональны** друг другу и имеют **единичную** длину:

$$(X_i, X_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j. \end{cases}$$

Матрица перехода от одного ОНБ к другому не может быть произвольной невырожденной матрицей. Запишем векторы произвольного базиса $\mathcal{B}$ в матрицу S по столбцам; она по определению есть матрица перехода к $\mathcal{B}$ от стандартного базиса $\{E^{(1)}, \dots, E^{(n)}\}$, являющегося ОНБ. Условие ортонормированности базиса $\mathcal{B}$ равносильно матричному равенству $S^\top S = E$, или $S^\top = S^{-1}$, что даёт также $SS^\top = E$. Такие же равенства выполнены для матрицы S^{-1} обратного перехода. Далее,

переход между любыми двумя ОНБ можно совершить в два шага, пройдя через стандартный базис, так что матрица перехода будет произведением двух матриц с этим свойством, но

$$S^T S = E \quad \text{и} \quad T^T T = E \quad \implies \quad (ST)^T (ST) = T^T \overset{\text{red}}{S}^T \overset{\text{red}}{S} T = E.$$

По той же причине (упражнение) получается, что $(SX, SY) = (X, Y)$ для всех $X, Y \in \mathbb{R}^n$. Поэтому оператор, заданный матрицей со свойством $S^T S = E$, сохраняет все углы, длины и вообще всё, что выражается через скалярное произведение. Итак, это условие несомненно выделяет очень важный класс матриц.

Теорема. *Равносильны следующие свойства вещественной квадратной матрицы S :*

- (1) она является матрицей перехода между ОНБ;
- (2) её столбцы образуют ОНБ;
- (3) её строки образуют ОНБ;
- (4) умножение любого вектора на S сохраняет его длину;
- (5) умножение любой пары векторов на S сохраняет угол между ними;
- (6) $S^T S = E = S S^T$;
- (7) $S^T = S^{-1}$.

Доказательство. Упражнение, развлечение (намёки уже даны). □

Определение. Матрица с такими свойствами называется **ортогональной**.

Утверждение. *Определитель всякой ортогональной матрицы равен ± 1 .*

Доказательство. Поскольку $(\det S)^2 = \det(S^T S) = \det E = 1$. □

Строение маломерных ортогональных матриц

Теорема. *Всякая ортогональная 2×2 или 3×3 матрица S задаёт либо поворот, либо композицию поворота и отражения. (Тождественное преобразование считаем поворотом.)*

Доказательство. (2×2) Из условия $S^T S = E$ легко найти конкретный вид матрицы S :

$$S = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix} \quad \text{или} \quad S = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{bmatrix}.$$

(3×3) Характеристический многочлен матрицы S кубический, а потому имеет корень $\lambda \in \mathbb{R}$. Для принадлежащего ему собственного вектора $\mathbf{v}$ заданного матрицей S оператора S находим

$$0 \neq (\mathbf{v}, \mathbf{v}) = (S\mathbf{v}, S\mathbf{v}) = (\lambda\mathbf{v}, \lambda\mathbf{v}) = \lambda^2(\mathbf{v}, \mathbf{v}) \implies \lambda = \pm 1.$$

Проверим, что ортогональная к $\mathbf{v}$ плоскость Π инвариантна:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} \in \Pi &\implies 0 = (\mathbf{v}, \mathbf{w}) = (S\mathbf{v}, S\mathbf{w}) = (\lambda\mathbf{v}, S\mathbf{w}) \\ &\implies 0 = (\mathbf{v}, S\mathbf{w}) \\ &\implies S\mathbf{w} \in \Pi. \end{aligned}$$

Если остальные корни — комплексно сопряжённая пара, то в Π происходит поворот, а прямая $\langle \mathbf{v} \rangle$ есть ось вращения. В случае $\lambda = -1$ происходит также отражение $\mathbb{R}^3$ относительно Π . Случай полностью вещественного спектра даёт отражения. □

Диагонализация симметричных матриц

Матрицу A называют симметричной, если $A^T = A$. Это слегка похоже на условие ортогональности и равносильно тому, что $(AX, Y) = (X, AY)$ для всех $X, Y \in \mathbb{R}^n$, поскольку последнее равенство разворачивается в $X^T A^T Y = X^T A Y$.

Теорема. *Для всякой симметричной матрицы A :*

- (1) собственные векторы, отвечающие различным собственным числам, ортогональны;
- (2) найдётся ОНБ из собственных векторов;

(3) найдутся такая диагональная матрица D и такая ортогональная матрица S , что $D = S^T A S = S^{-1} A S$.

Заметим, что здесь совпали два закона преобразования матриц, встречавшихся в разных главах курса: по закону $S^T A S$ преобразуются матрицы квадратичной формы, а по закону $S^{-1} A S$ — матрицы оператора. Поэтому понятия и результаты теории операторов оказываются приложимы к приведению поверхностей второго порядка к каноническому виду (не только в $\mathbb{R}^3$, но и в $\mathbb{R}^n$).

Доказательство. Формулировка тут очень ёмкая, особенно (2), и нужно установить несколько по сути разных фактов. Проверим для начала, что собственные векторы $\mathbf{v}_i$, принадлежащие различным собственным числам λ_i заданной матрицей A оператора, ортогональны друг другу:

$$\begin{aligned} 0 &= (A\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) - (\mathbf{v}_1, A\mathbf{v}_2) \\ &= (\lambda_1 \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) - (\mathbf{v}_1, \lambda_2 \mathbf{v}_2) \\ &= (\lambda_1 - \lambda_2)(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) \implies (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = 0. \end{aligned}$$

Также надо выбрать ортогональный базис в каждом собственном подпространстве. Это возможно вообще в любом подпространстве, что устанавливается в следующем разделе.

Для диагонализации оператора прямая сумма его собственных подпространств должна давать всё пространство. Итак, остаётся найти достаточное количество собственных векторов. В малых размерностях это легко делается кустарно, но вскоре мы получим и общее доказательство.

(2 × 2) Характеристический многочлен матрицы A квадратный, а его дискриминант Δ , равный $(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}^2$, неотрицателен; более того, если A не скалярная матрица λE , то $\Delta > 0$, характеристические корни различны и у каждого есть свой собственный вектор.

(3 × 3) Характеристический многочлен матрицы A кубический, а потому имеется корень $\lambda \in \mathbb{R}$ и принадлежащий ему собственный вектор $\mathbf{v}$ заданной матрицей A оператора A . Как и в случае ортогональной матрицы, ортогональная к $\mathbf{v}$ плоскость Π инвариантна:

$$\begin{aligned} \mathbf{w} \in \Pi &\implies 0 = (\lambda \mathbf{v}, \mathbf{w}) = (A\mathbf{v}, \mathbf{w}) = (\mathbf{v}, A\mathbf{w}) \\ &\implies A\mathbf{w} \in \Pi. \end{aligned}$$

В плоскости Π задача свелась к уже разобранному 2-мерному случаю, ибо сужение оператора A на Π унаследует его симметричность. $\square$

Метод ортогонализации Грама — Шмидта

Выберем ненулевой вектор $\mathbf{v}$. Как и в обычном трёхмерном пространстве, можно разложить любой вектор на две составляющие: первая коллинеарна $\mathbf{v}$ и называется проекцией на $\mathbf{v}$, а вторая ортогональна $\mathbf{v}$. Формула для нахождения проекции выводится также и остаётся прежней,

$$\text{pr}_{\mathbf{v}} \mathbf{x} = \frac{(\mathbf{v}, \mathbf{x})}{(\mathbf{v}, \mathbf{v})} \mathbf{v},$$

однако впредь мы привыкаем ставить $\mathbf{x}$ на второе место в числителе, поскольку в комплексном случае получится именно так.

Теорема. Для всякого списка векторов $\mathcal{X}$ найдутся ортогональный и ортонормированный базисы линейной оболочки $\langle \mathcal{X} \rangle$.

Простейший алгоритм построения ортогонального базиса называют **методом ортогонализации Грама — Шмидта**, хотя им пользовались гораздо раньше них (как минимум Лаплас раньше на век). Этот метод безразличен к способу вычисления скалярных произведений и потому работает без изменений в любом пространстве, включая и комплексные. То же самое относится ко всему дальнейшему «ортогональному» материалу, излагаемому до введения комплексных скалярных произведений.

Доказательство. Достаточно рассмотреть линейно независимые списки. Однако на практике линейная зависимость между векторами $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\}$, если она есть, всегда обнаруживается в ходе вычислений. Строим ортогональный базис $\{\mathbf{h}_1, \dots, \mathbf{h}_s\}$ последовательно: на каждом шаге цикла вычитанием проекций находим новый вектор

$$\mathbf{h}_k = \mathbf{x}_k - \sum_{1 \leq j < k} \text{pr}_{\mathbf{h}_j} \mathbf{x}_k.$$

Если предыдущие $\mathbf{h}_i$ ортогональны между собой, то и $\mathbf{h}_k$ ортогонален им, ибо для всех $i < k$

$$(\mathbf{h}_i, \mathbf{h}_k) = (\mathbf{h}_i, \mathbf{x}_k) - \sum_{1 \leq j < k} (\mathbf{h}_i, \text{pr}_{\mathbf{h}_j} \mathbf{x}_k) = (\mathbf{h}_i, \mathbf{x}_k) - (\mathbf{h}_i, \text{pr}_{\mathbf{h}_i} \mathbf{x}_k) = 0.$$

Равенство $\mathbf{h}_k = \mathbf{0}$ означает, что $\mathbf{x}_k \in \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{k-1} \rangle$; в таком случае мы выбрасываем ненужный $\mathbf{x}_k$, а (удобства ради) **остаток** списка $\mathcal{X}$, который **ещё не был задействован**, перенумеровываем. В случае $\mathbf{h}_k \neq \mathbf{0}$ нормирование даёт единичный вектор $\mathbf{f}_k = \mathbf{h}_k / \|\mathbf{h}_k\|$.

В описанном методе всегда $\mathbf{h}_k, \mathbf{f}_k \in \langle \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k \rangle$; **поэтому**, при линейной независимости $\mathcal{X}$, **матрицы перехода** от $\mathcal{X}$ к построенным базисам **верхнетреугольны**. $\square$

Следствие. Всякая невырожденная матрица A представляется произведением QR , где Q ортогональна, а R треугольна.

Доказательство. Столбцы любой невырожденной матрицы A образуют базис пространства $\mathbb{R}^n$. Ортогонализация его методом Грама — Шмидта даст столбцы, которые мы соберём в ортогональную матрицу Q и получим равенство $A = QR$ с верхнетреугольной матрицей перехода R . $\square$

Разложение вектора по ортонормированной системе

Упражнение 1 (теорема Пифагора). Если в списке $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ все векторы ортогональны друг другу, то

$$\left\| \sum_{1 \leq i \leq k} \mathbf{x}_i \right\|^2 = \sum_{1 \leq i \leq k} \|\mathbf{x}_i\|^2.$$

Лемма. Для любого ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ и любого вектора $\mathbf{x}$ выполнено равенство

$$\mathbf{x} = \sum_{1 \leq i \leq n} \text{pr}_{\mathbf{e}_i} \mathbf{x} = \sum_{1 \leq i \leq n} (\mathbf{e}_i, \mathbf{x}) \mathbf{e}_i.$$

Доказательство. Запишем $\mathbf{x} = \sum x_j \mathbf{e}_j$ и найдём неизвестные коэффициенты, скалярно умножая обе части на $\mathbf{e}_i$. $\square$

Величины $(\mathbf{e}_i, \mathbf{x})$ называются **ковекторными** координатами вектора $\mathbf{x}$. Когда базис не ортонормирован, векторные и ковекторные координаты одного и того же вектора обычно отличаются, но мы не будем сейчас углубляться в этот вопрос. Лемма утверждает, что в ОНБ привычные векторные и непривычные ковекторные координаты совпадают.

Упражнение 2 (равенство Парсеваля). Для любого ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ и любого вектора $\mathbf{x}$ верно

$$\|\mathbf{x}\|^2 = \sum_{1 \leq i \leq n} |(\mathbf{e}_i, \mathbf{x})|^2.$$

Теорема (неравенство Бесселя). Для любого ортонормированного списка $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k\}$ выполнено

$$\|\mathbf{x}\|^2 \geq \sum_{1 \leq i \leq k} \|\text{pr}_{\mathbf{e}_i} \mathbf{x}\|^2 = \sum_{1 \leq i \leq k} |(\mathbf{e}_i, \mathbf{x})|^2$$

для каждого вектора $\mathbf{x}$. Равенство достигается $\iff \mathbf{x}$ лежит в линейной оболочке $\langle \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k \rangle$. В частности, равенство достигается для всех векторов $\iff \{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k\}$ является базисом.

Доказательство. Если необходимо, дополним исходный список до ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$. Полагая для краткости $x_i = (\mathbf{e}_i, \mathbf{x})$, запишем равенство Парсеваля и отделим последние слагаемые:

$$\|\mathbf{x}\|^2 = \sum_{1 \leq i \leq n} |x_i|^2 = \sum_{1 \leq i \leq k} |x_i|^2 + \sum_{k < i \leq n} |x_i|^2 \geq \sum_{1 \leq i \leq k} |x_i|^2.$$

Равенство достигается $\iff$ выделенная вторая сумма равна нулю. Оно достигается для всех векторов $\iff$ нет вектора, не являющегося линейной комбинацией векторов исходного списка. $\square$

Ортогональное дополнение к подпространству

Договоримся для удобства записывать условие ортогональности произвольных подмножеств $\mathcal{X}$ и $\mathcal{Y}$ пространства **в краткой форме**:

$$(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = 0 \iff (\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0 \text{ для всех } \mathbf{x} \in \mathcal{X} \text{ и всех } \mathbf{y} \in \mathcal{Y},$$

и **опускать фигурные скобки**, когда одно из подмножеств содержит единственный вектор ($\mathcal{X} = \{\mathbf{x}\}$).

Упражнение 3. Проверьте, что $(\mathbf{x}, \mathcal{Y}) = 0 \iff (\mathbf{x}, \langle \mathcal{Y} \rangle) = 0$ для всяких $\mathbf{x} \in \mathcal{V}$ и $\mathcal{Y} \subseteq \mathcal{V}$, то есть подмножество в таком условии всегда можно заменить его линейной оболочкой. Аналогично, $(\mathcal{X}, \mathcal{Y}) = 0 \iff (\langle \mathcal{X} \rangle, \langle \mathcal{Y} \rangle) = 0$ для всяких $\mathcal{X}, \mathcal{Y} \subseteq \mathcal{V}$.

В линейном пространстве $\mathcal{V}$ почти все подпространства имеют много дополнений. Способа выбрать среди них «лучшее» в общем случае нет. А вот при наличии в $\mathcal{V}$ скалярного произведения такой способ есть: каждое подпространство $\mathcal{L}$ имеет **ортогональное дополнение**

$$\mathcal{L}^\perp = \{\mathbf{x} \in \mathcal{V} \mid (\mathbf{x}, \mathcal{L}) = 0\}.$$

Теорема. В пространстве $\mathcal{V}$ со скалярным произведением для каждого подпространства $\mathcal{L}$:

- (1) ортогональное дополнение $\mathcal{L}^\perp$ является подпространством;
- (2) $\mathcal{V} = \mathcal{L} \oplus \mathcal{L}^\perp$, чем и оправдан термин для $\mathcal{L}^\perp$;
- (3) $(\mathcal{L}^\perp)^\perp = \mathcal{L}$.

Доказательство. (1) Подставим в определение линейную комбинацию векторов из $\mathcal{L}$.

(2) Выберем в $\mathcal{L}$ любой базис, дополним его до базиса всего $\mathcal{V}$ и ортогонализируем. Полученный ОНБ можно разбить на две части $\mathcal{X}$ и $\mathcal{Y}$ так, что $\mathcal{X}$ будет базисом $\mathcal{L}$. Тогда $\langle \mathcal{Y} \rangle \subseteq \mathcal{L}^\perp$, ибо $(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0$. Возьмём вектор $\mathbf{x} + \mathbf{y}$ вне $\langle \mathcal{Y} \rangle$, так что $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$. Тогда $(\mathbf{x}, \mathbf{x} + \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, \mathbf{x}) \neq 0$, поэтому $\mathbf{x} + \mathbf{y} \notin \mathcal{L}^\perp$. Значит, $\langle \mathcal{Y} \rangle = \mathcal{L}^\perp$. Однако по построению $\mathcal{V} = \langle \mathcal{X} \cup \mathcal{Y} \rangle = \langle \mathcal{X} \rangle \oplus \langle \mathcal{Y} \rangle$.

(3) Следует из описания $\mathcal{L}^\perp$ в предыдущем абзаце. $\square$

Стандартное эрмитово пространство

Эрмитово сопряжение

Благодаря своим особым свойствам, вещественные ортогональные и симметричные матрицы применяются очень широко. Практически такими же свойствами обладают их комплексные обобщения, изучаемые в этом разделе; все определения отличаются от вещественного случая лишь наличием комплексного сопряжения в нужных местах. Главное из этих мест — естественное обобщение транспонирования. Операция **эрмитова сопряжения** $A \mapsto \bar{A}^\top$ выполняется комплексным сопряжением всех элементов матрицы и транспонированием её, а порядок этих двух шагов не важен. Несколько обозначений в ходу для матрицы $\bar{A}^\top$: в математике обычно A^* , а физики пишут $A^\dagger$ или A^+ . При чтении лишь значок кинжала ни с чем нельзя спутать. Отметим, что всегда $(A^\dagger)^\dagger = A$.

Оснастим линейное пространство $\mathbb{C}^n$ комплексных столбцов скалярным произведением:

$$(X, Y) = X^\dagger Y = \bar{X}_1 Y_1 + \dots + \bar{X}_n Y_n.$$

Тогда для каждого комплексного вектора X однозначно определена вещественная неотрицательная величина

$$\|X\| = \sqrt{(X, X)} = \sqrt{|X_1|^2 + \dots + |X_n|^2},$$

имеющая смысл **длины** этого вектора. Упустив комплексное сопряжение при первой наивной попытке ввести скалярное произведение, мы лишились бы понятия длины. Вместо линейности по первому аргументу, мы наблюдаем здесь свойство

$$(\alpha X, Y) = \bar{\alpha} (X, Y) \text{ для всех } \alpha \in \mathbb{C}.$$

Комплексное линейное пространство со скалярным произведением называют **эрмитовым** либо **унитарным пространством**. Там, как и в вещественном евклидовом пространстве, имеются ортонормированные базисы.

Ортонормированные базисы $\mathbb{C}^n$ и унитарные матрицы

Лемма. Равносильны свойства комплексной матрицы, аналогичные определяющим свойствам вещественной ортогональной матрицы, с заменой транспонирования на эрмитово сопряжение.

Доказательство. Упражнение. $\square$

Определение. Матрица с такими свойствами называется **унитарной** ($U^\dagger U = E$).

Пример. Диагональная матрица является унитарной, если и только если все её диагональные элементы по модулю равны 1. Например, в размерности 3 она имеет вид

$$\begin{bmatrix} e^{i\varphi_1} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_2} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\varphi_3} \end{bmatrix}, \quad \varphi_k \in \mathbb{R}.$$

Следствие. Произведение унитарных матриц унитарно.

Следствие. Определитель всякой унитарной матрицы по модулю равен 1.

Доказательство. Обозначим $\det U = z$. Тогда $\det U^\dagger = \bar{z}$ и $U^\dagger U = E$ влечёт $|z|^2 = \bar{z}z = 1$. $\square$

Теорема. Всякая невырожденная комплексная матрица A представляется произведением QR , где Q унитарна, а R треугольна.

Доказательство. Полностью аналогично вещественному QR -разложению. $\square$

Унитарная триангуляция Шура

Теорема (Schur). Для всякой комплексной матрицы A найдутся унитарная матрица U и треугольная матрица T такие, что $U^\dagger A U = T$.

Иными словами, всякая комплексная матрица унитарно подобна треугольной матрице. Это означает, что всякий линейный оператор можно представить треугольной матрицей в подходящем ОНБ. Если в теореме Шура взять вещественную матрицу A с полностью вещественным спектром, то всё вычисление становится вещественным, а матрица перехода U будет ортогональна. Без вещественности спектра достичь триангуляции ортогональным переходом не удастся, ибо на диагонали в T оказываются собственные числа A .

Доказательство. Возьмём $\lambda_1 \in \text{Spec } A$. Соответствующий собственный вектор $\mathbf{v}_1$ дополним произвольно до базиса $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$ всего пространства $\mathbb{C}^n$. В нём матрица оператора A принимает блочный верхнетреугольный вид:

$$S^{-1} A S = B = \left[\begin{array}{c|c} \lambda_1 & * \\ \hline 0 & B_1 \end{array} \right].$$

Воспользуемся QR -разложением $S = Q_1 R$ с верхнетреугольной матрицей R . Заметим, что тогда $Q_1^\dagger A Q_1 = Q_1^{-1} A Q_1 = R B R^{-1}$ также имеет блочный верхнетреугольный вид

$$\left[\begin{array}{c|c} \lambda_1 & * \\ \hline 0 & A_1 \end{array} \right].$$

Повторяя трюк для блока A_1 , найдём унитарную матрицу Q_2 , дающую

$$Q_2^\dagger Q_1^\dagger A Q_1 Q_2 = \left[\begin{array}{c|c|c} \lambda_1 & * & * \\ \hline 0 & \lambda_2 & * \\ \hline 0 & 0 & A_2 \end{array} \right].$$

Продолжая триангуляцию, напомним произведение $U = Q_1 Q_2 \dots Q_{n-1}$ унитарных матриц перехода, а оно всегда унитарно. $\square$

Эрмитовы матрицы и спектральная теорема

Определение. Эрмитовой (или самосопряжённой) называется комплексная матрица $A = A^\dagger$.

Теорема. Всякая эрмитова матрица A обладает полностью вещественным спектром и ОНБ из собственных векторов.

Доказательство. По теореме Шура найдём U и $T = U^\dagger A U$. Тогда

$$T^\dagger = U^\dagger A^\dagger U = U^\dagger A U = T.$$

Треугольная матрица T ещё и эрмитова! Такой может быть только вещественная диагональная матрица. Спектры подобных матриц A и T одинаковы, а искомый собственный ОНБ для матрицы A составляют столбцы матрицы U . $\square$

В частности, здесь доказаны спектральные свойства вещественных симметричных матриц, анонсированные ранее.

Теорема. Всякая симметричная вещественная матрица A обладает полностью вещественным спектром и ОНБ из вещественных собственных векторов.

Доказательство. Такая матрица является эрмитовой, поэтому вещественность спектра следует. Для вещественной матрицы с полностью вещественным спектром решения линейных уравнений $A\mathbf{v} = \lambda\mathbf{v}$ тоже вещественны. $\square$

Другие версии спектральной теоремы

Определение. Косоэрмитовой (или кососамосопряжённой) называется комплексная матрица $A = -A^\dagger$.

Теорема. Всякая косоэрмитова матрица A обладает полностью мнимым спектром и ОНБ из собственных векторов.

Полная мнимость означает, что $\Re \lambda = 0$ для всех $\lambda \in \text{Спекс } A$, так что $\lambda = 0$ допускается и, более того, в нечётных размерностях всегда присутствует.

Доказательство. Как и выше, получим из теоремы Шура, что $A^\dagger = -A$ влечёт $T^\dagger = -T$. Тогда T диагональна и её диагональ полностью мнимая. $\square$

Теорема. Всякая унитарная матрица A обладает ОНБ из собственных векторов, а спектр её состоит из чисел, равных 1 по модулю.

Доказательство. Как и выше, получим из теоремы Шура, что $A^\dagger = A^{-1}$ влечёт $T^\dagger = T^{-1}$ и тогда T диагональна. $\square$

Упражнение 4. Сформулируйте и докажите спектральную теорему для матриц со свойством $A^\dagger A = A A^\dagger$, которое покрывает все три только что рассмотренных случая.

Общие евклидовы и эрмитовы пространства

Стандартное скалярное произведение

Скалярное произведение векторов вводилось сперва в «обычном» трёхмерном пространстве:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = x_1 y_1 + x_2 y_2 + x_3 y_3;$$

затем в вещественном пространстве столбцов $\mathbb{R}^n$:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = X^\top Y = \sum_{1 \leq k \leq n} x_k y_k;$$

и наконец, в комплексном пространстве столбцов $\mathbb{C}^n$:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = X^\dagger Y = \sum_{1 \leq k \leq n} \bar{x}_k y_k.$$

Назовём эти скалярные произведения **стандартными**.

Необходимо не забывать о наличии в последней формуле комплексного сопряжения. Без него **норме** $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}$ нельзя придать смысл длины вектора $\mathbf{x}$, ибо она не обязательно будет вещественным числом. Однако навесить комплексное сопряжение можно либо на компоненты первого вектора, либо на компоненты второго, и оба варианта распространены в математике. Мой выбор — всегда сопрягать первый вектор. Во-первых, запись $X^\dagger Y$ элегантнее, чем $X^\top \bar{Y}$. Во-вторых, в квантовой механике принято поступать именно так, хотя сами скалярные произведения обозначают иначе, следуя Дираку. (Великий Дирак высоко ценил элегантность формул.)

Свойства стандартного вырастают в аксиомы общего

Непосредственно из координатных формул видны основные свойства стандартных скалярных произведений. Это (анти)линейность по первому аргументу:

$$(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}_1, \mathbf{y}) + (\mathbf{x}_2, \mathbf{y}), \quad (\alpha \mathbf{x}, \mathbf{y}) = \bar{\alpha}(\mathbf{x}, \mathbf{y});$$

линейность по второму аргументу:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_2) = (\mathbf{x}, \mathbf{y}_1) + (\mathbf{x}, \mathbf{y}_2), \quad (\mathbf{x}, \beta \mathbf{y}) = \beta(\mathbf{x}, \mathbf{y});$$

эрмитова симметричность:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \overline{(\mathbf{y}, \mathbf{x})};$$

положительная определённость:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \geq 0, \quad \text{причём } (\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 0 \implies \mathbf{x} = \mathbf{0}.$$

Эрмитовым (также унитарным) **пространством** называют линейное пространство $\mathcal{V}$ над $\mathbb{C}$ вместе с определённой на нём комплекснозначной функцией двух аргументов, обладающей перечисленными свойствами. Саму эту функцию называют скалярным произведением, или **эрмитовой структурой**. Аналогично, с заменой всего комплексного на всё вещественное, вводят **евклидово пространство**.

Какие они бывают?

Зафиксируем базис $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ эрмитова пространства $\mathcal{V}$. Выражая в этом базисе векторы и получаемые из них величины, будем применять обозначения как матричные, так и индексные (вместе с правилом Эйнштейна, т. е. опуская знаки суммирования).

Преобразуем скалярное произведение двух векторов $\mathbf{x} = x^i \mathbf{e}_i$ и $\mathbf{y} = y^j \mathbf{e}_j$, пользуясь аксиомами:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (x^i \mathbf{e}_i, y^j \mathbf{e}_j) = \bar{x}^i (y^j \mathbf{e}_j, \mathbf{e}_i) = \bar{x}^i y^j (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j).$$

Значит, для вычисления любых скалярных произведений достаточно знать скалярные произведения $g_{ij} \triangleq (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j)$. Матрицу $G = G(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$, составленную из этих чисел, называют **матрицей Грама** выбранного базиса. По определению и аксиоме эрмитовой симметричности $G^\dagger = G$. Базис является ОНБ тогда и только тогда, когда $G = E$. В матричной записи получаем вычислительную формулу

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = X^\dagger G Y.$$

Упражнение 5. Выведите формулу $G' = S^\dagger G S$ изменения матрицы Грама при переходе к новому базису, где S есть матрица перехода.

Упражнение 6. Проследите пошагово поведение матрицы Грама в процессе ортогонализации с нормированием ($\mathbf{v}_j \rightsquigarrow \mathbf{f}_j$) и без него ($\mathbf{v}_j \rightsquigarrow \mathbf{h}_j$). Что происходит с её определителем?

Лемма. Матрица Грама всякого списка векторов неотрицательно определена.

Для $G = G(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k)$ это значит, что $X^\dagger G X \geq 0$ для всех столбцов $X \in \mathbb{C}^k$. Пишут $G \geq 0$.

Доказательство. Каждый столбец $X = (x_1, \dots, x_k)^\top$ задаёт вектор $\mathbf{x} = x_1 \mathbf{v}_1 + \dots + x_k \mathbf{v}_k$, причём $(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = X^\dagger G X$ неотрицательно по последней из аксиом скалярного произведения. $\square$

Упражнение 7. Докажите, что $G(\mathcal{X})$ невырождена (значит, положительно определена) тогда и только тогда, когда список $\mathcal{X}$ линейно независим.

Наоборот, начнём с любого линейного пространства $\mathcal{V}$ без эрмитовой структуры. При любом выборе в нём базиса и любом выборе положительно определённой эрмитовой матрицы G в качестве его матрицы Грама функция, вычисляемая по формуле $X^\dagger G Y$, задаёт эрмитову структуру на $\mathcal{V}$. А по сказанному выше, всякая эрмитова структура получается таким образом, других не бывает.

Неравенство Коши и углы

Теорема. Для всех пар векторов евклидова или эрмитова пространства выполнено неравенство

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y})(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \leq (\mathbf{x}, \mathbf{x})(\mathbf{y}, \mathbf{y}).$$

Равенство достигается $\iff$ векторы линейно зависимы (коллинеарны).

Доказательство. Неравенство утверждает, что неотрицателен определитель матрицы Грама

$$G(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{bmatrix} (\mathbf{x}, \mathbf{x}) & (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ (\mathbf{y}, \mathbf{x}) & (\mathbf{y}, \mathbf{y}) \end{bmatrix},$$

а это установлено в лемме. Утверждение о равенстве следует из упражнения 7. $\square$

Следствие (неравенство Коши). $|(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq \|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|$.

Следствие (неравенство треугольника). $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\| \leq \|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|$.

Доказательство. К неравенству

$$2 \Re(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \leq 2|(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq 2\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|$$

прибавим $\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2$. Получим слева $\|\mathbf{x} + \mathbf{y}\|^2$, а справа $(\|\mathbf{x}\| + \|\mathbf{y}\|)^2$. $\square$

Из неравенства Коши ясно, что в евклидовом пространстве углы находят по обычной формуле

$$\cos \varphi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|} \implies -1 \leq \cos \varphi \leq 1.$$

В эрмитовом же пространстве приходится побороть не вещественность скалярного произведения $(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ взятием его по модулю, что ведёт к отсутствию тупых углов: $\cos \varphi \geq 0$.

Объёмы и расстояния

Ортонормированность выбранного базиса выражается равенством $G = E$, а единичная матрица выпадает из формул, ведь в произведениях она просто незаметна. Так что одной из первых задач геометрии евклидова пространства становится получение формул, применимых в любом базисе.

Для любого списка $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ векторов линейного пространства $\mathcal{V}$ назовём параллелепипедом на $\mathcal{X}$ множество

$$\mathcal{P}(\mathcal{X}) = \{\alpha_1 \mathbf{x}_1 + \dots + \alpha_k \mathbf{x}_k \mid 0 \leq \alpha_j \leq 1 \text{ для всех } 1 \leq j \leq k\}.$$

Не будем огорчаться, когда в случае линейно зависимого списка параллелепипед вырождается.

Теорема. В евклидовом или эрмитовом пространстве для любого списка $\mathcal{X} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_k\}$ векторов квадрат k -мерного объёма параллелепипеда $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ равен определителю матрицы Грама $G(\mathcal{X})$.

Доказательство. Если список $\mathcal{X}$ линейно зависим, то и k -мерный объём, и определитель равны нулю. Если нет, то ограничим рассмотрение на линейную оболочку $\langle \mathcal{X} \rangle$. Обозначим через S матрицу перехода от какого-то ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k\}$ этой оболочки к её базису $\mathcal{X}$. По формуле перехода получим $G(\mathcal{X}) = S^\dagger E S$, так что $\det G(\mathcal{X}) = |\det S|^2$. Определитель матрицы перехода равен по модулю коэффициенту искажения объёмов, то есть отношению объёма образа $\mathcal{P}(\mathcal{X})$ к объёму исходного кубика $\mathcal{P}(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_k)$.

Можно рассуждать немного иначе, строя из $\mathcal{X}$ ортогональный базис методом Грама — Шмидта без нормирования. При этом сохраняются и объём, и $\det G$. В итоге параллелепипед прямоуголен, а G диагональна, так что обе части искомого равенства получаются перемножением компонент. $\square$

Следствие. В евклидовом или эрмитовом пространстве квадрат расстояния от точки $\mathbf{x}_0$ до линейного подпространства с базисом $\mathcal{X}$ равен

$$\text{dist}(\mathbf{x}_0, \langle \mathcal{X} \rangle)^2 = \frac{\det G(\{\mathbf{x}_0\} \cup \mathcal{X})}{\det G(\mathcal{X})}.$$

Доказательство. Рассуждение аналогично выводу формулы для расстояния между скрепляющимися прямыми в $\mathbb{R}^3$. Искомое расстояние находится как высота параллелепипеда, равная его объёму, поделённому на «площадь» основания, которая также есть объём параллелепипеда, но имеющего размерность на единицу ниже. $\square$

Нормальные операторы

Сопряжённый оператор

Утверждение. На евклидовом или эрмитовом пространстве $\mathcal{V}$ для каждого линейного оператора A найдётся единственный такой линейный оператор A^* , что

$$(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A^*\mathbf{y})$$

для всех векторов $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{V}$.

Доказательство. Выберем в $\mathcal{V}$ ортонормированный базис, соответственно представим требуемое равенство в матричном виде $(AX)^\dagger Y = X^\dagger (A^*Y)$ и преобразуем левую часть в $X^\dagger A^\dagger Y$. Искомый сопряжённый оператор A^* задаётся эрмитово сопряжённой матрицей $A^\dagger$. $\square$

Столь простое выражение матрицы сопряжённого оператора наводит на мысль, что этот объект весьма полезен. Найдём теперь формулу для матрицы сопряжённого оператора в произвольном базисе с матрицей Грама G :

$$\left. \begin{aligned} (A\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= (AX)^\dagger GY = X^\dagger A^\dagger GY \\ (\mathbf{x}, A^*\mathbf{y}) &= X^\dagger G(A^*Y) = X^\dagger GA^*Y \end{aligned} \right\} \implies A^* = G^{-1}A^\dagger G.$$

Упражнение 8. Проверьте, что $(A^*)^* = A$ для всякого линейного оператора A .

Упражнение 9. Проверьте, что $\text{Spec } A^* = \overline{\text{Spec } A}$ для всякого линейного оператора A . Иными словами, $\lambda \in \text{Spec } A \iff \bar{\lambda} \in \text{Spec } A^*$.

Упражнение 10. Проверьте, что $A^*(\mathcal{L}) \subseteq \mathcal{L} \iff A(\mathcal{L}^\perp) \subseteq \mathcal{L}^\perp$ для всякого линейного оператора A и всякого подпространства $\mathcal{L}$.

Спектральная теорема

Эрмитово сопряжённая матрица $A^\dagger$ возникает в записях условий, определяющих принадлежность матрицы A к одному из трёх замечательных классов: эрмитовы ($A^\dagger = A$), косоэрмитовы ($A^\dagger = -A$), унитарные ($A^\dagger A = E$). Естественно выделить аналогичными условиями три класса операторов: эрмитовы ($A^* = A$), косоэрмитовы ($A^* = -A$), унитарные ($A^* A = E$). Есть и альтернативные названия: самосопряжённые, кососопряжённые, **изометричные**, а на евклидовом пространстве — симметричные, кососимметричные, ортогональные.

При знакомстве с этими классами можно приэкономить немало времени, заметив условие, обобщающее все три указанных. Оператор A на евклидовом или эрмитовом пространстве называют **нормальным**, если $A^* A = A A^*$.

Ключом к пониманию строения нормальных операторов служит спектральная теорема.

Теорема. Следующие условия на оператор A на **эрмитовом** пространстве $\mathcal{V}$ равносильны:

- (1) $A^* A = A A^*$;
- (2) пространство $\mathcal{V}$ обладает собственным ортонормированным базисом для A .

Напомним, что второе условие означает, что $\mathcal{V}$ обладает ортонормированным базисом, в котором матрица оператора A диагональна. В евклидовом пространстве эта теорема верна только для операторов с полностью вещественным спектром.

Нам пригодится утверждение из первой части весеннего курса.

Лемма. Если операторы A и B коммутируют, то каждое собственное подпространство для A инвариантно под действием B .

Доказательство теоремы. ($2 \Rightarrow 1$) Когда $G = E$, матрица $A^* = A^\dagger$ диагональна одновременно с матрицей A , и тогда они коммутируют.

($1 \Rightarrow 2$) Выберем $\lambda \in \text{Spec } A$. Собственное подпространство $\mathcal{V}^\lambda$ по определению инвариантно под действием A , а по лемме ещё и под действием A^* . Тогда его ортогональное дополнение $(\mathcal{V}^\lambda)^\perp$ инвариантно под действием как A , так и A^* по упражнениям 10 и 8.

Применяя индукцию по размерности пространства $\mathcal{V}$, считаем, что ограничение A на $(\mathcal{V}^\lambda)^\perp$ обладает собственным ОНБ. Дополняя его ортонормированным базисом $\mathcal{V}^\lambda$, получаем искомый собственный ОНБ для исходного оператора. $\square$

Спектральные портреты

Первым шагом к пониманию устройства конкретного нормального оператора является знание его спектра. Изображение спектра на комплексной плоскости называют **спектральным портретом**.

Нам уже известно, что спектр эрмитова оператора вещественен. Это можно получить и напрямую, подставляя один и тот же собственный вектор вместо $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ в условие $(A\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\mathbf{x}, A\mathbf{y})$. Заметим, что если оператор A эрмитов, то оператор iA — косоэрмитов. Отсюда следует, что спектр косоэрмитова оператора чисто мнимый. Далее, унитарный оператор сохраняет нормы всех векторов: $(A\mathbf{x}, A\mathbf{x}) = (\mathbf{x}, \mathbf{x})$. Подставляя в это условие собственный вектор оператора A с собственным числом λ , мы увидим, что $\bar{\lambda}\lambda = 1$.

Класс	Оператор	Спектр
эрмитовы	$A^* = A$	$\bar{\lambda} = \lambda$
косоэрмитовы	$A^* = -A$	$\bar{\lambda} = -\lambda$
унитарные	$A^* A = E$	$\bar{\lambda}\lambda = 1$
нормальные	$A^* A = A A^*$	$\bar{\lambda}\lambda = \lambda\bar{\lambda}$

Возникшая табличка ясно указывает на то, что понятие сопряжённого оператора является операторным аналогом комплексного сопряжения. При этом эрмитов оператор является аналогом вещественного числа, а унитарный — числа с единичным модулем. Основное применение эрмитовых операторов в физике связано с их ролью наблюдаемых величин в квантовой механике, где унитарные также определяют эволюцию квантовой системы во времени.

Канонические виды

Казалось бы, спектральная теорема для нормальных операторов полностью закрывает вопрос о каноническом виде такого оператора: он диагонален; на диагонали стоят собственные числа; получены простые ограничения на их значения для трёх важнейших классов. Это так и есть, но только в

комплексном случае. В вещественном случае утверждение верно для симметричных операторов, но для кососимметричных и ортогональных диагонализация требует перехода к базису комплексного пространства. Тем не менее, из последней можно извлечь блочный диагональный вещественный вид, называемый каноническим.

Теорема. Для всякого ортогонального оператора на евклидовом пространстве найдётся вещественный ОНБ, в котором его матрица блочная диагональная с блоками

$$[\pm 1], \quad \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}.$$

Теорема. Для всякого кососимметричного оператора на евклидовом пространстве найдётся вещественный ОНБ, в котором его матрица блочная диагональная с блоками

$$[0], \quad \begin{bmatrix} 0 & \rho \\ -\rho & 0 \end{bmatrix}.$$

Доказательство обеих. Одномерные блоки содержат немногие возможные вещественные корни.

Невещественные корни характеристического многочлена вещественного оператора всегда появляются комплексно-сопряжёнными парами $\{\lambda, \bar{\lambda}\}$; более того, собственные векторы для них также можно выбрать комплексно-сопряжёнными парами $\{\mathbf{v}, \bar{\mathbf{v}}\}$. Двумерные подпространства $\langle \mathbf{v}, \bar{\mathbf{v}} \rangle$ инвариантны. В комплексном диагональном виде всегда можно расположить элементы пар рядом и затем сгруппировать их, заметив подобие матриц

$$\begin{bmatrix} \rho \cos \varphi & \rho \sin \varphi \\ -\rho \sin \varphi & \rho \cos \varphi \end{bmatrix} = U^{-1} \begin{bmatrix} \rho e^{i\varphi} & 0 \\ 0 & \rho e^{-i\varphi} \end{bmatrix} U, \quad \text{где } U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & -i \\ 1 & i \end{bmatrix}.$$

В двумерном подпространстве $\langle \mathbf{v}, \bar{\mathbf{v}} \rangle$ унитарная матрица U осуществляет «поворот» от малого ОНБ $\{\mathbf{v} = \mathbf{a} + i\mathbf{b}, \bar{\mathbf{v}} = \mathbf{a} - i\mathbf{b}\}$ к малому вещественному ОНБ

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{v} + \bar{\mathbf{v}}), \frac{1}{i\sqrt{2}}(\mathbf{v} - \bar{\mathbf{v}}) \right\} = \{\sqrt{2}\mathbf{a}, \sqrt{2}\mathbf{b}\}.$$

Композиция всех таких переходов внутри пар в итоге приводит от большого комплексного ОНБ, гарантированного спектральной теоремой, к большому вещественному ОНБ. Найдя его, вполне можно «забыть» о том, что по пути использовалось комплексное пространство. $\square$

Диагонализация коммутирующих самосопряжённых операторов

Теорема. Следующие условия на семейство самосопряжённых операторов на евклидовом или эрмитовом пространстве $\mathcal{V}$ равносильны:

- (1) все операторы семейства коммутируют друг с другом;
- (2) пространство $\mathcal{V}$ обладает ортонормированным базисом, собственным одновременно для всех операторов семейства.

Иными словами, коммутирующие самосопряжённые операторы диагонализуемы одновременно. Это свойство имеет фундаментальное значение для квантовой механики, где оно означает, что коммутирующие наблюдаемые можно точно измерить одновременно, а некоммутирующие — нельзя.

Доказательство. (2 $\Rightarrow$ 1) Все диагональные матрицы коммутируют друг с другом.

(1 $\Rightarrow$ 2) Адаптируем к текущей ситуации доказательство спектральной теоремы для нормальных операторов. Возьмём из семейства любой оператор A и выберем $\lambda \in \text{Sp} A$. Собственное подпространство $\mathcal{V}^\lambda$ для оператора A по определению инвариантно под действием A , а по лемме — даже под действием всех операторов семейства. Далее, по упражнению 10 его ортогональное дополнение $(\mathcal{V}^\lambda)^\perp$ инвариантно под действием $A^* = A$ и также всех операторов семейства.

При $\mathcal{V}^\lambda \neq \mathcal{V}$ задача распадается на две, поскольку в соответствии с инвариантным разложением $\mathcal{V} = \mathcal{V}^\lambda \oplus (\mathcal{V}^\lambda)^\perp$ все операторы семейства обретают блочно диагональные виды. Применяя **индукцию** по размерности пространства $\mathcal{V}$, составим искомый общий для семейства собственный ОНБ из **найденных** таких ОНБ слагаемых.

При $\mathcal{V}^\lambda = \mathcal{V}$ любой ОНБ является собственным для A , поэтому достаточно диагонализировать все остальные операторы семейства, для чего можно применить индукцию по их количеству. Даже если семейство бесконечно (возможность чего и отличает семейство от набора), это можно сделать аккуратно: количество существенных шагов ограничено сверху размерностью пространства $\mathcal{V}$. $\square$

Указанный последним шаг доказательства обращает наше внимание на то обстоятельство, что общие собственные векторы, принадлежащие одному собственному значению оператора A из такого коммутирующего семейства, могут принадлежать разным собственным значениям другого оператора семейства. Это типичная ситуация в квантовой механике; например, так (в общих чертах) возникает деление электронных оболочек в атоме на орбитали.

Разложения операторов и матриц

Углубим обнаруженную выше аналогию строения операторов с комплексными числами. При работе с последними применяются две формы записи: $z = x + iy$ и $z = \rho e^{i\varphi}$. По сути, это разложения комплексного числа в сумму и произведение более «простых» объектов. При этом

$$x = \Re z = \frac{1}{2}(z + \bar{z}), \quad y = \Im z = \frac{1}{2i}(z - \bar{z}), \quad \rho = \sqrt{z\bar{z}}, \quad e^{i\varphi} = \rho^{-1}z.$$

Эрмитово разложение оператора

Операторная аналогия разложения в сумму проходит без запинок: выписываются налагаемые требования, а из них решением элементарных уравнений находятся искомые компоненты.

Теорема. *Каждый линейный оператор A на евклидовом или эрмитовом пространстве однозначно представляется в виде $A = \Re A + i \Im A$, где операторы $\Re A$ и $\Im A$, называемые вещественной и мнимой частями оператора A , эрмитовы.*

Упражнение 11. *Эти компоненты находятся по формулам*

$$\Re A = \frac{1}{2}(A + A^*), \quad \Im A = \frac{1}{2i}(A - A^*).$$

Упражнение 12. *Докажите, что нормальность оператора A равносильна коммутированию его вещественной и мнимой частей.*

Алгебраические структуры на операторах

Множество всех эрмитовых операторов на фиксированном пространстве $\mathcal{V}$ само является вещественным линейным пространством, ибо линейные комбинации эрмитовых операторов с вещественными коэффициентами также эрмитовы, что прямо следует из определения сопряжённого оператора и аксиом скалярного произведения. На операторах есть также операция умножения (композиции), но легко убедиться, что композиция эрмитовых операторов редко эрмитова.

Упражнение 13. *Проверьте, что эрмитовость произведения AB эрмитовых операторов равносильна их коммутированию.*

С помощью эрмитова разложения выделим из композиции вещественную часть. Операция

$$A \circ B = \Re(AB) = \frac{1}{2}(AB + BA)$$

на эрмитовых операторах называется **Йордановым произведением**. Её стандартное обозначение кружочком $\circ$ не слишком удачно: его легко перепутать с композицией. Половина нужна, чтобы получалось $E \circ E = E$. Эта операция дистрибутивна относительно линейных комбинаций и потому заслуживает называться произведением. Йорданово произведение оказывается неассоциативным:

$$(A \circ B) \circ C \neq A \circ (B \circ C),$$

хотя равенство выполнено (упражнение) при $A = C$. Итак, алгебраическая структура пространства наблюдаемых не попадает в изучавшиеся прежде классы. Теперь это класс **Йордановых алгебр**.

Выделяя из композиции мнимую часть, получим $\frac{1}{2i}(AB - BA)$. Присутствие мнимой единицы не украшает такую операцию. Но тут можно схитрить, перейдя от эрмитовых операторов к косоэрмитовым. Множество косоэрмитовых операторов также является вещественным линейным пространством, но на нём определена операция

$$[A, B] = AB - BA,$$

называемая **коммутатором** или **скобкой Ли**. Она также дистрибутивна относительно линейных комбинаций и неассоциативна, а также лишена единицы, но обладает свойствами

$$\begin{aligned} [A, B] + [B, A] &= 0; \\ [[A, B], C] + [[B, C], A] + [[C, A], B] &= 0. \end{aligned}$$

Такая структура, очень важная и в математике, и в физике, называется **алгеброй Ли**. Вы уже видели примеры алгебр Ли: векторное произведение в $\mathbb{R}^3$; векторные поля со скобками Пуассона.

Что до множества унитарных операторов — оно не является линейным пространством, не содержит ни нуля, ни линейных комбинаций. На нём есть только операция композиции, которая ассоциативна, а также допускает единичный элемент (тождественный оператор) и обратный к каждому элементу. Это также пример важнейшего типа структур, называемых **группами**.

Полярное разложение оператора

Операторная аналогия разложения в произведение может иметь вид $A = PU$ либо $A = UP$, но ввиду априорной некоммутативности умножения операторов компоненты первой записи могут отличаться от одноимённых компонент второй. Оператор U заменяет фазовый множитель $e^{i\varphi}$, а значит, он должен быть унитарен. Оператор P заменяет (неотрицательный вещественный) модуль комплексного числа, а значит, он должен быть эрмитов и, более того, неотрицателен, то есть, все его собственные числа должны быть вещественны и неотрицательны.

Теорема. Каждый линейный оператор A на евклидовом или эрмитовом пространстве имеет как левое полярное разложение $A = PU$, так и правое полярное разложение $A = U'P'$ с неотрицательными эрмитовыми операторами P, P' и унитарными операторами U, U' .

Упражнение 14. Докажите, что нормальность оператора A равносильна коммутированию его эрмитового и унитарного сомножителей.

Геометрически полярное разложение можно понимать как реализацию любого линейного оператора композицией двух операторов: унитарный сомножитель, сохраняющий нормы всех векторов, осуществляет набор поворотов (в вещественном пространстве он может проявиться с отражением); эрмитов сомножитель осуществляет растяжения и сжатия вдоль собственных направлений.

Упражнение 15. Проверьте, что для любого линейного оператора A на евклидовом или эрмитовом пространстве операторы AA^* и A^*A эрмитовы и неотрицательны.

Из таких операторов можно извлекать неотрицательные квадратные корни.

Упражнение 16. Найдите формулы для вычисления в ОНБ матриц операторов $\sqrt{AA^*}$ и $\sqrt{A^*A}$ по матрице положительного эрмитова оператора A . Однозначен ли полученный ответ в случае вырожденного неотрицательного оператора?

Тогда если $A = PU$, то $AA^* = PUU^*P^* = PEP = P^2$. Поэтому, можно однозначно найти $P = \sqrt{AA^*}$, а также и $U = P^{-1}A$, но только в том случае, когда оператор P обратим. Для правого полярного разложения $A = UP$ аналогично находим $P = \sqrt{A^*A}$ и $U = AP^{-1}$.

Для вырожденных операторов A полученные формулы для U непригодны, но само полярное разложение существует и может быть найдено через сингулярное разложение.

Сингулярные числа оператора и даже отображения

Пример. Рассмотрим оператор A на обычной плоскости $\mathbb{R}^2$, заданный в стандартном ОНБ матрицей

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

Его действие можно описать словом «перекашивание». Разумеется, этот оператор не нормален, ведь A есть жорданова клетка. Изучим, как A искажает длины (нормы) векторов. Ввиду линейности, достаточно понять, как выглядит прообраз единичной окружности. Решаем уравнение $\|Ax\| = 1$, или в координатах $X^T A^T A X = 1$ с матрицей

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Это уравнение, $x_1^2 + 2x_1x_2 + 2x_2^2 = 1$, задаёт эллипс. Полуоси направлены по собственным векторам v_1, v_2 оператора A^*A и равны по длине соответствующим собственным числам в степени $-\frac{1}{2}$.

Видно также, что оператор A равен композиции трёх более простых операторов:

- (1) поворот от собственного ОНБ $\{v_1, v_2\}$ для $A^T A$ к стандартному базису;
- (2) два растяжения вдоль координатных осей;
- (3) поворот обратно к собственному ОНБ.

Определение. Неотрицательный квадратный корень из собственного числа оператора A^*A называют **сингулярным числом** оператора A , и аналогично для матриц.

Обычно список сингулярных чисел конкретного оператора или матрицы упорядочивают по невозрастанию: $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. Их геометрический смысл ясен из обобщения рассмотренного примера на произвольную размерность: прообраз многомерной сферы есть не менее многомерный эллипсоид (либо «эллипсоидный цилиндр» когда оператор A вырожден). Сингулярные числа важны в разнообразных приложениях линейной алгебры. На практике, собственные числа

рисунок

во многом проигрывают сингулярным; достаточно упомянуть **общность** конструкции и зависимость от всяческих ошибок при расчётах (погрешности измерения, компьютерное округление).

На самом деле, определение сингулярных чисел имеет смысл не только для оператора, но и для любого линейного **отображения** $A: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{U}$ евклидовых или эрмитовых пространств. Необходимое для того **сопряжённое отображение** $A^*: \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{V}$ вводится почти той же формулой $(Ax, y) = (x, A^*y)$, что и в частном случае оператора, хотя тут слева скалярное произведение в $\mathcal{U}$, а справа в $\mathcal{V}$. Множителями в матрицу сопряжённого отображения входят две матрицы Грама разных базисов разных пространств, никак между собой не связанные, но иных отличий от случая операторов нет.

Упражнение 17. Докажите, что для любой матрицы A ранги матриц A , $A^\dagger A$ и $AA^\dagger$ равны.

Сингулярное разложение матрицы

Лемма. Для всякого линейного отображения A евклидовых или эрмитовых пространств найдётся такой ОНБ $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$, что $(A\mathbf{v}_i, A\mathbf{v}_j) = 0$ при $i \neq j$.

Доказательство. Искомый базисом служит собственный ОНБ неотрицательного эрмитова оператора $A^*A: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$. Действительно, тогда

$$(A\mathbf{v}_i, A\mathbf{v}_j) = (\mathbf{v}_i, A^*A\mathbf{v}_j) = \sigma_j^2(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = \begin{cases} \sigma_i^2 & \text{при } i = j, \\ 0 & \text{при } i \neq j, \end{cases}$$

где σ_i^2 есть (неотрицательное вещественное) собственное число оператора A^*A . Нет ничего страшного в том, что в общем случае некоторые образы $A\mathbf{v}_i$ могут быть нулевыми. $\square$

Теорема. Каждая комплексная матрица A представляется в виде $A = U\Sigma V^\dagger$, где матрицы U и V унитарны, а диагональная матрица Σ составлена из сингулярных чисел $\sigma_1(A), \dots, \sigma_n(A)$.

Для вещественной матрицы A вместо унитарных сомножителей такого разложения можно найти ортогональные.

Построение обобщает разложение оператора в разобранный выше двумерном примере. Отметим, что сингулярным разложением $A = U\Sigma V^\dagger$ обладают все **прямоугольные** матрицы, а не только квадратные. Отличие общего случая лишь в том, что блочная матрица

$$\Sigma = \left[\begin{array}{c|c} \Sigma_+ & 0 \\ \hline 0 & 0 \end{array} \right]$$

не обязательно квадратна, а квадратен только её блок $\Sigma_+ = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$, составленный из положительных сингулярных чисел. В зависимости от соотношения размеров и ранга исходной $m \times n$ матрицы A два или три указанных нулевых блока могут отсутствовать.

Доказательство. Применим лемму к линейному отображению $A: \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}^m$ стандартных эрмитовых пространств, представленному в стандартных ОНБ матрицей A . При этом можно упорядочить $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ по невозрастанию длин образов $A\mathbf{v}_i$, равных σ_i по доказательству леммы. Ненулевые образы линейно независимы ввиду их ортогональности. Нормируем их и дополним полученную ортонормированную систему до ОНБ $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$ пространства $\mathbb{C}^m$. Унитарный оператор, переводящий стандартный ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ в ОНБ $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$, задаётся унитарной матрицей; это и будет V . Унитарный оператор, переводящий стандартный ОНБ $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_m\}$ в ОНБ $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$, задаётся унитарной матрицей; это и будет U . Теперь в три шага получаем

$$\mathbf{e}_i \mapsto V\mathbf{e}_i = \mathbf{v}_i \mapsto A\mathbf{v}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i \mapsto U^{-1}(\sigma_i \mathbf{u}_i) = \sigma_i \mathbf{e}_i$$

для всех $1 \leq i \leq n$, причём $\sigma_i = 0$ при $i > r = \text{rk } A$. Значит, $U^\dagger A V = \Sigma$ и $A = U\Sigma V^\dagger$. $\square$

Следствие. Для всякого отображения $A: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{U}$ евклидовых или эрмитовых пространств в них найдутся такие ОНБ, что матрица отображения принимает указанный выше вид Σ .

Доказательство. Выбрав любые ОНБ, можно работать с произвольными пространствами как со стандартными. Затем нужно перейти к ОНБ $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ и $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_m\}$, найденным как в предыдущем построении сингулярного разложения матрицы. $\square$

Наконец, можно найти обещанные формулы для полярных разложений произвольного оператора, включая вырожденные. Зная сингулярное разложение $A = U\Sigma V^\dagger$, положим $W = UV^\dagger$. Тогда

$$A = (U\Sigma U^\dagger)W = W(V\Sigma V^\dagger),$$

причём матрица W унитарна, а матрицы $U\Sigma U^\dagger$ и $V\Sigma V^\dagger$ неотрицательные эрмитовы.

21.04

Спектральное разложение нормального оператора

Возьмём теперь произвольный нормальный оператор A на эрмитовом пространстве $\mathcal{V}$. Спектральная теорема даёт прямое разложение

$$\mathcal{V} = \bigoplus_{\lambda \in \text{Spec } A} \mathcal{V}^\lambda$$

всего пространства на собственные подпространства, причём векторы из различных собственных подпространств ортогональны друг другу. Для каждого $\lambda \in \text{Spec } A$ обозначим через P_λ оператор проектирования на $\mathcal{V}^\lambda$:

$$P_\lambda(\mathbf{x}) = \begin{cases} \mathbf{x} & \text{для } \mathbf{x} \in \mathcal{V}^\lambda, \\ \mathbf{0} & \text{для } \mathbf{x} \in \mathcal{V}^\mu \text{ при } \lambda \neq \mu. \end{cases}$$

В собственном (диагонализующем) ОНБ пространства $\mathcal{V}$ для оператора A матрица каждого P_λ также диагональна, причём по диагонали стоят единицы «напротив» базиса подпространства $\mathcal{V}^\lambda$, а все остальные компоненты нулевые. Таким образом, $(P_\lambda)^* = P_\lambda$, $P_\lambda P_\lambda = P_\lambda$, а $P_\lambda P_\mu = 0$ при $\lambda \neq \mu$. Кроме того, $P_\lambda A = AP_\lambda = \lambda P_\lambda$.

Сумма всех указанных проекторов равна тождественному оператору:

$$E = \sum_{\lambda \in \text{Spec } A} P_\lambda.$$

Умножая это равенство на A , получаем спектральное разложение оператора A :

$$A = \sum_{\lambda \in \text{Spec } A} \lambda P_\lambda.$$

Спектральное разложение чаще всего формулируют для эрмитовых операторов, но для вывода достаточно нормальности. Эти же рассуждения пригодны в вещественном случае для всякого симметричного оператора, поскольку для него имеется собственный ОНБ.

Функциональное исчисление

Возьмём оператор A , обладающий спектральным разложением, и произвольную (но обычно достаточно хорошую) комплекснозначную функцию, определённую на всех $\lambda \in \text{Spec } A$. Определим оператор $f(A)$ равенством

$$f(A) = \sum_{\lambda \in \text{Spec } A} f(\lambda) P_\lambda.$$

Например, выше при обсуждении полярного разложения нам пришлось вычислять квадратные корни из неотрицательных операторов. Для вырожденных операторов обнаружилось препятствие — неоднозначность корня, что объясняется плохим поведением комплексной функции $f(z) = \sqrt{z}$ в точке $z = 0$, называемой точкой ветвления.

Эти операторные функции удовлетворяют всем привычным функциональным соотношениям:

$$f(A)g(A) = (fg)(A), \quad \exp(iA) = \cos A + i \sin A,$$

и так далее.

Упражнение 18. Докажите, что если оператор A эрмитов, то вещественные функции от него также дают эрмитовы операторы.