9.5. Унитарные и эрмитовы матрицы

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. 21.11

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.

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

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

Тогда для каждого комплексного вектора X однозначно определена вещественная неотрицательная величина

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

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

$$(\alpha X, Y) = \bar{\alpha}(X, Y).$$

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

Лемма. *Эквивалентны следующие свойства комплексной квадратной матрицы U:*

(1) *она является матрицей перехода между ОНБ;*
(2) *умножение любого вектора на U сохраняет его длину;*
(3) *её столбцы образуют ОНБ;*
(4) $U^\dagger U = E = UU^\dagger$;
(5) $U^\dagger = U^{-1}$.

Доказательство. Упражнение. □

Определение. Такая матрица называется **унитарной**.

Пример. Диагональная матрица является унитарной если и только если все её диагональные элементы по модулю равны 1.

Следствие. *Определитель всякой унитарной матрицы по модулю равен 1.*

Следствие. *Произведение унитарных матриц унитарно.*

Теорема. *Для всякого списка $\mathcal{X} = \{\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_m\}$ векторов унитарного пространства найдётся ОНБ $\{\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_s\}$ линейной оболочки $\langle \mathcal{X} \rangle$.*

Доказательство. Алгоритм построения требуемого ОНБ называют **методом ортогонализации Грама — Шмидта**.

Достаточно рассмотреть линейно независимые списки. Однако на практике линейная зависимость между векторами заданного списка обнаруживается в ходе вычислений. Строим $\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_s$ последовательно; на одном шаге цикла сначала вычисляем вспомогательный вектор

$$\mathbf{h}_k = \mathbf{v}_k - \sum_{1 \leqslant j < k} (\mathbf{v}_k, \mathbf{f}_j)\mathbf{f}_j,$$

нормирование которого и даёт единичный вектор

$$\mathbf{f}_k = \mathbf{h}_k / \sqrt{(\mathbf{h}_k, \mathbf{h}_k)}.$$

При этом всегда $\mathbf{h}_k, \mathbf{f}_k \in \langle \mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_k \rangle$. Равенство $\mathbf{h}_k = \mathbf{0}$ означает, что $\mathbf{v}_k \in \langle \mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_{k-1} \rangle$; в таком случае мы выбрасываем ненужный $\mathbf{v}_k$, а (удобства ради) остаток списка $\mathcal{X}$ перенумеровываем.

Ортонормированность списка $\{\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_{k-1}\}$ влечёт ортонормированность списка $\{\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_{k-1}, \mathbf{f}_k\}$. Действительно, для всех $i < k$ имеем

описки в индексах на лекции

$$\begin{aligned}
(\mathbf{h}_k, \mathbf{f}_i) &= (\mathbf{v}_k, \mathbf{f}_i) - \sum_{1 \leqslant j < k} (\mathbf{v}_k, \mathbf{f}_j)(\mathbf{f}_j, \mathbf{f}_i) \\
&= (\mathbf{v}_k, \mathbf{f}_i) - (\mathbf{v}_k, \mathbf{f}_i)(\mathbf{f}_i, \mathbf{f}_i) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

После остановки процесса получаем искомый ОНБ оболочки $\langle \mathcal{X} \rangle$. □

Матрица перехода между базисами $(\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_s)$ и $(\mathbf{f}_1, \ldots, \mathbf{f}_s)$ всегда будет верхнетреугольной. Кроме того, если исходный список веществен, то таковы же все составляющие формул в методе ортогонализации, поэтому вещественен и искомый ОНБ.

Следствие (QR-разложение)**.** *Всякая невырожденная комплексная матрица A представляется произведением QR, где Q унитарна, а R треугольна.*

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

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

Иными словами, всякая комплексная матрица унитарно подобна треугольной матрице. Это означает, что всякий линейный оператор можно представить треугольной матрицей в подходящем ОНБ.

Доказательство. Возьмём $\lambda_1 \in \operatorname{Spec} \mathsf{A}$. Соответствующий собственный вектор $\mathbf{v}_1$ дополним произвольно до базиса $(\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n)$. В нём матрица оператора A принимает блочный верхнетреугольный вид:

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

Воспользуемся QR-разложением $S = Q_1R$ с верхнетреугольной матрицей R. Тогда $Q_1^\dagger AQ_1 = Q_1^{-1}AQ_1 = RBR^{-1}$ 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 такую унитарную матрицу Q_2, что

$$Q_2^\dagger Q_1^\dagger AQ_1Q_2 = \left[\begin{array}{c|c|c} \lambda_1 & * & * \\ \hline 0 & \lambda_2 & * \\ \hline 0 & 0 & A_2 \end{array}\right],$$

и т.д. Накопленное произведение $Q_1Q_2 \dots Q_{n-1}$ этих матриц перехода даёт искомую унитарную матрицу U. $\square$

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.

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

Теорема. *Всякая эрмитова матрица A имеет полностью вещественный спектр и ОНБ из собственных векторов.*

Доказательство. По теореме Шура найдём U и $T = U^\dagger AU$. Тогда $T^\dagger = U^\dagger A^\dagger U = U^\dagger AU = T$. Треугольная матрица T ещё и эрмитова! Такой может быть только вещественная диагональная матрица. Поскольку матрицы A и T подобны, их спектры одинаковы. Искомый ОНБ составляют столбцы матрицы U. $\square$

В частности, здесь доказаны спектральные свойства вещественных симметричных матриц, анонсированные ранее в этой главе с целью геометрических приложений.