2. prednáška

Lineárna algebra II – *skalárny súčin, norma, metrika, ortogonálnosť, ortonormálnosť, ortogonálny doplnok, lineárne operátory, maticová reprezentácia, hodnosť a defekt operátorov*

2.1 Skalárny súčin

Definícia 2.1. Binárna operácia, ktorá dvom vektorom $\alpha,\beta \in H$ priradí skalár $(\alpha,\beta) \in \mathcal{C}$ sa nazýva ***skalárny súčin*** vtedy a len vtedy, ak platia tieto 4 axiómy:
(1) $(\alpha,\beta) = (\beta,\alpha)^*$,
(2) $(\alpha,a\beta) = a(\alpha,\beta)$,
(3) $(\alpha,\beta_1+\beta_2) = (\alpha,\beta_1)+(\alpha,\beta_2)$,
(4) $(\alpha,\alpha) \geq 0 \quad (=0 \text{ len pre } \alpha = o)$.

Z axióm 1 a 2 plynie

$$(a\alpha,\beta) = (\beta,a\alpha)^* = a^*(\beta,\alpha)^* = a^*(\alpha,\beta)$$

Podobne, z axióm 1 a 3 dostaneme

$$(\alpha_1+\alpha_2,\beta) = (\beta,\alpha_1+\alpha_2)^* = (\beta,\alpha_1)^* + (\beta,\alpha_2)^* = (\alpha_1,\beta)+(\alpha_2,\beta)$$

Skalárny súčin ľubovolného vektora $\alpha \in H$ s nulovým vektorom o je nula

$$(\alpha,o) = (\alpha,0\beta) = 0(\alpha,\beta) = 0$$

Ak v lineárnom priestore H je definovaný skalárny súčin, potom H sa nazýva ***unitárny priestor***. V tomto bode sa dostávame do kontaktu aj s teóriou Hilbertových priestorov, Hilbertov priestor konečnej dimenzie je totožný s unitárnym priestorom. Prevážna väčšina našich úvah o kvantovom počítaní je založená na konečno-rozmernom Hilbertovom priestore, preto vystačíme s teóriou konečno-rozmerných unitárnych priestorov.

Veta 2.1. Nech H je lineárny priestor realizovaný $\mathcal{C}^n$, potom pre každý vektor $\alpha = (a_1,a_2,\ldots,a_n)$, kde $a_i \in \mathcal{C}$. Binárna operácia pre vektory α a $\beta = (b_1,b_2,\ldots,b_n)$

$$(\alpha,\beta) = \sum_{i=1}^{n} a_i^* b_i \tag{2.1}$$

vyhovuje axiómam skalárneho súčinu z definície 2.1.

Dôkaz vety 2.1 je uskutočnený v príklade 2.1.

Pre unitárne priestory je potrebné zovšeobecniť definíciu 1.6 izomorfizmu. Nech H a G sú dva unitárne priestory v ktorých sú definované skalárne súčiny $(\bullet,\bullet)_H$ resp. $(\bullet,\bullet)_G$.

Pôvodná definícia izormorfizmu 1.6 je pre unitárne priestory rozšírená pomocou nasledujúcej definície.

Definícia 2.2. Unitárne priestory H a G sa nazývajú izomorfné ($H \sim G$) vtedy a len vtedy, ak existuje také 1-1 značné zobrazenie $f : H \to G$, ktoré zachováva lineárnu kombináciu vektorov a skalárny súčin

$$f\left(a_1\alpha_1 + a_2\alpha_2\right) = a_1 f\left(\alpha_1\right) + a_2 f\left(\alpha_2\right) \tag{2.2a}$$

$$(\alpha,\beta)_H = \left(f(\alpha), f(\beta)\right)_G \tag{2.2b}$$

Pomocou skalárneho súčinu môžeme definovať ***normu*** (***dĺžku***) vektora α takto

$$|\alpha| = \sqrt{(\alpha,\alpha)} \tag{2.3}$$

Veta 2.2. Pre normu platí Schwartzova nerovnosť

$$\left|(\alpha,\beta)\right| \le |\alpha||\beta| \tag{2.4}$$

Veta 2.2 je dokázaná v príklade 2.2. Pomocou normy môžeme definovať aj ***vzdialenosť*** (***metriku***) medzi dvoma vektormi α a b

$$d(\alpha,\beta) = |\alpha - \beta| \tag{2.5}$$

Niektoré základné vlastnosti normy a vzdialenosti sú dokázané v príklade 2.3 resp. 2.4.

Definícia 2.3. Vektor $\alpha \in H$ sa nazýva normalizovaný (normovaný) vtedy a len vtedy, ak

$$|\alpha| = 1$$

Definícia 2.4. Dva vektory $\alpha,\beta \in H$ sa nazývajú ***ortogonálne*** (čo zapisujeme $\alpha \perp \beta$) vtedy a len vtedy, ak ich skalárny súčin je nulový

$$(\alpha \perp \beta) \Leftrightarrow (\alpha,\beta) = 0$$

Relácia ortogonálnosti je symetrická ale nie je tranzitívna. Množina vektorov z $B = \{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_n\} \subset H$ sa nazýva ***ortogonálna***, ak pre každú dvojice rôznych vektorov z B platí

$$\left(\beta_i,\beta_j\right) = 0 \quad (\text{pre } i,j = 1,2,\ldots,n \text{ a } i \ne j) \tag{2.6}$$

Ak množina $B = \{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_n\} \subset H$ obsahuje vektory, ktoré sú súčasne normalizované a aj ortogonálne, potom táto množina sa nazýva ***ortonormálna***

$$\left(\beta_i,\beta_j\right) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (ak\ i = j) \\ 0 & (ak\ i \ne j) \end{cases} \tag{2.7}$$

Veta 2.3. Ak množina $B = \{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_n\} \subset H$ obsahuje nenulové ortogonálna vektory, potom tieto vektory sú lineárne nezávislé.

Táto veta je dokázaná v príklade 2.6. Z vlastnosti dokazovanej v príklade 2.6 vyplýva, že ak priestor H je n-rozmerný, potom existuje maximálne n ortogonálnych nenulových vektorov. V lineárnej algebre existuje konštruktívny dôkaz (nazývaný Schmidtov ortogonalizačný proces) skutočnosti, že v každom n-rozmernom lineármnom priestore H s definovaným skalárnym súčinom, existuje ortonormálna báza $B_{orthonorm} = \{\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, ..., \tilde{\beta}_n\} \subset H$.

Nech $B = \{\beta_1, \beta_2, ..., \beta_n\} \subset H$ je báza n-rozmerného lineárneho priestoru H v ktrom je definovaný skalárny súčin. ***Schmidtov ortogonalizačný proces*** je špecifikovaný rekuretným spôsobom takto:

1. krok. $\tilde{\beta}_1 = \beta_1$.
2. krok. $\tilde{\beta}_2 = a_1\tilde{\beta}_1 + \beta_2$, kde koeficient a_1 je určený podmienkou $\tilde{\beta}_1 \perp \tilde{\beta}_2$.
3. krok. $\tilde{\beta}_3 = a_1\tilde{\beta}_1 + a_2\tilde{\beta}_2 + \beta_3$, kde koeficienty a_1, a_2 sú určené podmienkami $\tilde{\beta}_3 \perp \tilde{\beta}_1$ a $\tilde{\beta}_3 \perp \tilde{\beta}_2$.

Tento postup opakujeme tak dlho až vyčerpáme všetky vektory z množiny *B*.

Nech $H_1 \subset H$ je lineárny podpriestor unitárneho priestoru *H*. Symbol $H_1^{\perp}$ reprezentuje takú množinu vektorov, nazývanú ***ortogonálny doplnok*** k podpriestoru H_1, ktoré sú ortogonálne k vektorom z podpriestora H_1

$$H_1^{\perp} = \{\alpha \in H; \forall(\beta \in H_1)(\alpha, \beta) = 0\} \tag{2.8}$$

Veta 2.4.
(1) Ak $H_1 \subset H$ je lineárny podpriestor, potom aj jeho ortogonálny doplnok $H_1^{\perp} \subset H$ je taktiež lineárny podpriestor .
(2) Unitárny priestor je možné vyjadriť ako priamu sumu podpriestoru $H_1 \subset H$ a jeho ortogonálneho doplnku $H_1^{\perp} \subset H$

$$H = H_1 \oplus H_1^{\perp} \tag{2.9}$$

Pre ortogonálne doplnky unitárneho priestoru *H* platia tieto vzťahy:
(1) Nech $H_1 \subset H$ je lineárny podpriestor, potom

$$\left(H_1^{\perp}\right)^{\perp} = H_1 \tag{2.10a}$$

(2) Ortogonálny komplement unitárneho priestoru *H* je

$$H^{\perp} = \{o\},\ \{o\}^{\perp} = H \tag{2.10b}$$

2.2 Lineárne operátory

Pojem operátora patrí v matematickej teórie kvantovej mechaniky medzi centrálne pojmy, každá pozorovateľná (alebo merateľná) veličina je v kvantovej mechanike vyjadrená pomocou operátora – zobrazenia lineárneho priestoru na seba.

Definícia 2.5. Hovoríme, že nad lineárnym priestorom *H* je definovaný ***lineárny operátor***

$$A: H \to H$$

vtedy a len vtedy, ak pre každé $\alpha \in H$ existuje práve jeden vektor $\beta \in H$ taký, že $\beta = A\alpha$, pričom je splnená podmienka

$$A(a_1\alpha_1 + a_2\alpha_2) = a_1 A\alpha_1 + a_2 A\alpha_2$$

Nech v n-rozmernom lineárnom priestore H existuje ortonormálna báza $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$, pomocou ktorej zavedieme maticovú reprezentáciu operátora. Pretože $A\beta_i \in H$, potom vektor $A\beta_i$ môžeme vyjadriť pomocou lineárnej kombinácie vektorov ortonormálnej báze

$$A\beta_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ji}\beta_j \tag{2.11a}$$

Ak vynásobíme skalárne túto rovnicu zľava vektorom β_k, po jednoduchých úpravách dostaneme

$$\left(\beta_k, A\beta_i\right) = A_{ki} \tag{2.11b}$$

Matica $\boldsymbol{A}=\left(A_{ij}\right)$ sa nazýva ***maticová reprezentácia*** operátora A v báze $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$, jej maticové elementy sú určené vzťahom (2.11b).

Môžeme si položiť otázku, ako sa zmení maticová reprezentácia operátora A pri prechode od ortonormálnej báze $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$ k inej ortonormálnej báze $B'=\{\beta'_1,\beta'_2,...,\beta'_n\}$. Pretože H je n-rozmerný unitárny priestor, každý vektor báze $B'=\{\beta'_1,\beta'_2,...,\beta'_n\}$ môže byť vyjadrený pomocou lineárnej kombinácie vektorov z pôvodnej bázy $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$

$$\beta'_i = \sum_{j=1}^{n} T_{ji}\beta_j \tag{2.12a}$$

Pretože matica $\boldsymbol{T}=\left(T_{ij}\right)$ popisuje prechod od pôvodnej ortonormálnej báze k novej ortonormálnej báze, musí byť regulárna, t. j. existuje inverzná matica $\boldsymbol{T}^{-1}$, ktorá vyhovuje podmienkam $\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{T}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{-1}=\boldsymbol{E}$. Potom platí aj „inverzná“ formula k (1.23a)

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{n} T_{ji}^{-1}\beta'_j \tag{2.12b}$$

Nech maticová reprezentácia operátora A v bázy $B'=\{\beta'_1,\beta'_2,...,\beta'_n\}$ má tvar

$$A\beta'_i = \sum_{j=1}^{n} B_{ji}\beta'_j \tag{2.13a}$$

kde maticové elementy reprezentácie sú určené formulou

$$\left(\beta'_k, A\beta'_i\right) = B_{ki} \tag{2.14b}$$

Jednoduchými úvahami je možné dokázať, že medzi týmito dvoma maticovými reprezentáciami operátora A existuje vzťah vyjadrení pomocou transformácie podobnosti

$$B_{ij} = \sum_{k,l=1}^{n} T_{ik}^{-1}A_{kl}T_{lj} \tag{2.15a}$$

alebo pomocou matíc

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} \tag{2.15b}$$

Pomocou maticovej reprezentácie operátorov zavedieme definície stopy a determinantu operátora A. Pripomeňme, že tieto veličiny sú definované v algebre len pre štvorcové matice, ich maticová reprezentácia umožňuje ich definíciu aj pre operátory, aby táto definícioa mala zmysel, musíme ukázať, že tak stopa, ako aj determinant sú nezávislé od ich maticovej reprezentácie.

Nech lineárny operátor A v báze $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$ je reprezentovaná maticou $\boldsymbol{A}=(A_{ij})$, potom stopa operátora A je definovaná pomocou stopy matice $\boldsymbol{A}$

$$Tr(A)=Tr(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{n}A_{ii} \tag{2.16}$$

Stopa súčinu dvoch štvorcovým je nezávislá od ich poradia

$$Tr(\boldsymbol{AB})=Tr(\boldsymbol{BA}) \tag{2.17}$$

Predpokladajme, že maticová reprezentácia operátora A pri prechode z pôvodnej báze $B=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$ do novej báze $B'=\{\beta_1',\beta_2',...,\beta_n'\}$ sa zmení podľa formule transformácie podobnosti (2.15b), jej stopa je

$$Tr(\boldsymbol{B})=Tr(\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{AT})=Tr\left(\underbrace{\boldsymbol{TT}^{-1}}_{\boldsymbol{E}}\boldsymbol{A}\right)=Tr(\boldsymbol{A}) \tag{2.18}$$

Týmto sme dokázali, že stopa maticovej reprezentácie operátora je nezávislá od zvolenej báze, pre každú bázu dostaneme rovnakú stopu maticovej reprezentácie daného operátora A.

Podobným spôsobom pomocou maticovej reprezentácie môžeme definovať aj determinant operátora A

$$det(A)=det(\boldsymbol{A}) \tag{2.19}$$

Determinat súčinu dvoch matíc sa rovná súčinu ich determinantov

$$det(\boldsymbol{AB})=det(\boldsymbol{A})det(\boldsymbol{B}) \tag{2.20}$$

Pomocou tejto vlastnosti determinantov taktiež dokážeme, že determinanty maticových reprezentácií toho istého operátora sú navzájom rovné

$$det(\boldsymbol{B})=det(\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{AT})=\underbrace{det(\boldsymbol{T}^{-1})det(\boldsymbol{T})}_{1}det(\boldsymbol{A})=det(\boldsymbol{A}) \tag{2.21}$$

V lineárnej algebre medzi dôležité špecifikácie matíc patrí patria dve komplementárne celočíselné charakteristiky matíc, hodnosť a defekt matice. Ich komplementárnosť spočíva v tom, že ich suma sa pre štvorcové matice rovná dimenzii matice (počtu riadkov/stĺpcov matice). Nech A je lineárny operátor definovaný nad n-rozmerným priestorom H, definujme si množinu jeho funkčných hodnôt

$$im(A)=\{\beta\in H;\exists(\alpha\in H):\beta=A\alpha\}\subseteq H \tag{2.22}$$

Definícia 2.6. Prirodzené číslo $r(A)$ sa nazýva ***hodnosť*** operátora A vtedy a len vtedy, ak sa rovná dimenzii podpriestoru im(A)

$r(A)=dim(im(A))$.

Celočíselná veličina nazývaná defekt operátora A je definovaná pomocou jadra oprátora

$$ker(A)=\{\alpha\in H;A\alpha=o\}\subseteq H \tag{2.23}$$

Táto množina vektorov obsahuje tie vektory z H, ktoré sú zobrazené na nulový vektor.

Definícia 2.7. Prirodzené číslo $d(A)$ sa nazýva ***defekt*** operátora A vtedy a len vtedy, ak sa rovná dimenzii podpriestoru $ker(A)$

$r(A)=dim(ker(A))$.

Podpriestory $im(A)$ a $ker(A)$ nie sú nezávislé, ich komplementárny charakter spočíva v tom, že ich priama suma sa rovná priestoru H nad ktorým je definovaný operátor A

$$im(A)\oplus ker(A)=H \tag{2.24a}$$

Potom taktiež aj hodnosť a defekt majú komplementárnych charakter

$$r(A)+d(A)=dim(H) \tag{2.24b}$$

Pomocou defektu zobrazenia môžeme definovať jeho 1-1-značnosť takto: Nech A je lineárny operátor v priestore H, tento operátor A je 1-1 značný vtedy a len vtedy, ak sa jeho hodnosť rovná dimenzii H

$$r(A)=dim(H) \tag{2.25}$$

V prvej časti tejto prednášky sme definovali maticovú reprezentáciu $\boldsymbol{A}$ lineárneho operátora A pomocou ortonormálnej bázy. Hodnosť operátora A sa rovná hodnosti jeho maticovej reprezentácie A v ľubovolnej ortogonálnej bázy B, čo formálne zapíšeme takto

$$\forall B: r(A)=r(\boldsymbol{A}) \tag{2.26}$$

Príklady

Príklad 2.1. Vykonajte dôkaz vety 2.1.

Príklad 2.2. Dokážte Schwartzovu nerovnosť (2.4).

Príklad 2.3. Dokážte tieto vlastnosti normy:

(1) $|\alpha|\geq 0 \quad (=0\ len\ pre\ \alpha=o)$,

(2) $|\alpha+\beta|\leq|\alpha|+|\beta|$ (trojuholníková nerovnosť, rovnosť platí len pre $\beta=a\alpha$),

(3) $|a\alpha|=|a||\alpha|$

Návod: Trojuholníková nerovnosť sa dokáže pomocou Schwartzovej nerovnosti (2.4).

Príklad 2.4. Dokážte tieto vlastnosti vzdialenosti:

(1) $d(\alpha,\beta)\geq 0 \quad (=0\ len\ pre\ \alpha=\beta)$,

(2) $d(\alpha,\beta)=d(\beta,\alpha)$,

(3) $d(\alpha,\beta)\leq d(\alpha,\gamma)+d(\gamma,\beta)$ (trojuholníková nerovnosť).

Návod: Trojuholníková nerovnosť pre vzdialenosť sa dokáže pomocou trojuholníkovej nerovnosti pre normu z príkladu 2.3.

Príklad 2.5. Nech $B=\{\beta_1,\beta_2,...\}\subset H$ je množina normovaných vektorov z n-rozmerného lineárneho priestoru a nech existuje také $e>0$, že pre každé $\alpha,\beta\in B, \alpha\neq\beta$, platí $|\alpha-\beta|\geq e$. Obsahuje množina B konečný počet vektorov?

Návod: Z trojuholníkovej nerovnosti (príklad 1.15) vyplýva, že ak pre dva normalizované vektory $\alpha,\beta\in B$ platí $|\alpha-\beta|\geq e$, potom sú lineárne nezávislé.

Príklad 2.6. Dokážte vetu 2.3.

Príklad 2.7. Nech $B=\{\beta_1=(1,0,1),\beta_2=(0,-1,1),\beta_3=(1,2,-1)\}\subset H$ je báza v 3-rozmernom lineárnom priestore H, použitím Schmidtovho ortogonalizačného procesu zostrojte z tejto bázy ortonormálnu bázu $B_{orthonorm}=\{\tilde{\beta}_1,\tilde{\beta}_2,\tilde{\beta}_3\}\subset H$.

Príklad 2.8. Dokážte vetu 2.4.

Príklad 2.9. Dokáže formule (2.10).

Príklad 2.10. Dokážte rovnosť (2.17).

Príklad 2.11. Dokážte, že množina $im(A)$ je podpriestor lineárneho operátora H.

Príklad 2.12. Dokážte, že množina $ker(A)$ je podpriestor lineárneho operátora H.

Príklad 2.13. Dokážte (2.24a), priama suma podpriestoru fumkčných hodnôt a jadra operátora sa rovná priestoru H.

Príklad 2.14. Dokážte, že formula (2.25) je nutnou a postačujúcou podmienkou k tomu, aby operátor A bol 1-1 značný.