Lineární algebra II (pro fyziky)

Ortogonalizace

Dalibor Šmíd

MFF UK

Ortogonální projekce P_W na podprostor W unitárního prostoru V je definována pomocí ortonormální báze $(w_1, \ldots, w_k)$ ve W. Jak takovou bázi najít?

Uvažujme nejprve $\dim W = 2$ a bázi (u_1, u_2) prostoru W, která není ortogonální. Položme $v_1 := u_1$ a $v_2 := u_2 + \lambda u_1$. Pak

$$\langle v_1, v_2 \rangle = \langle u_1, u_2 + \lambda u_1 \rangle = \langle u_1, u_2 \rangle + \lambda \langle u_1, u_1 \rangle$$

Volba $\lambda = -\frac{\langle u_1, u_2 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle}$ znamená ortogonalitu báze (v_1, v_2) ve W. Navíc pak

$$v_2 = u_2 - \frac{\langle u_1, u_2 \rangle}{\langle u_1, u_1 \rangle} u_1 = u_2 - P_{u_1}(u_2) = (\mathrm{Id} - P_{v_1})(u_2)$$

ON bázi pak získáme normalizací $w_1 := \frac{v_1}{\|v_1\|}$, $w_2 := \frac{v_2}{\|v_2\|}$.

Postup zobecníme pro libovolné $k \in \mathbb{N}$.

Věta (Gramova-Schmidtova ortogonalizace)
Nechť $(V, \langle , \rangle)$ je unitární prostor a $B = (u_1, \ldots, u_n)$ jeho báze. Pak existuje ortonormální báze $C = (w_1, \ldots, w_n)$ prostoru V taková, že $\forall k \in \{1, \ldots, n\}$: $\langle u_1, \ldots, u_k \rangle = \langle w_1, \ldots, w_k \rangle$.

Důkaz věty i postup výpočtu jsou zde totéž. Je-li pro nějaké k zkonstruována OG báze $(v_1, \ldots, v_k)$ prostoru $W_k := \langle u_1, \ldots, u_k \rangle$, položme

$$v_{k+1} := u_{k+1} - P_{W_k}(u_{k+1}) = u_{k+1} - \sum_{i=1}^{k} \frac{\langle v_i, u_{k+1} \rangle}{\|v_i\|^2} v_i$$

Pak $(v_1, \ldots, v_k, v_{k+1})$ je OG báze W_{k+1} ♣. Normalizace $\forall i : w_i := \frac{v_i}{\|v_i\|}$ z ní udělá ON bázi.

V $\mathbb{R}^4$ se std. skalárním součinem ortogonalizujme posloupnost

$$(u_1 := (1,2,2,-1), u_2 := (1,1,-5,3), u_3 := (3,2,8,-7))$$

Tedy $v_1 := u_1$ a

$$\begin{aligned} v_2 &:= u_2 - \frac{\langle u_2, v_1 \rangle}{\|v_1\|^2} v_1 = (1,1,-5,3) - \frac{-10}{10}(1,2,2,-1) \\ &= (2,3,-3,2) \end{aligned}$$

Vidíme, že skutečně $v_2 \perp v_1$. Spočteme $\|v_2\|^2 = 26$, $\langle u_3, v_1 \rangle = 30$ a $\langle u_3, v_2 \rangle = -26$, takže

$$\begin{aligned} v_3 &:= (3,2,8,-7) - \frac{30}{10}(1,2,2,-1) - \frac{-26}{26}(2,3,-3,2) \\ &= (2,-1,-1,-2), \end{aligned}$$

což je opět vektor kolmý na v_2 i v_1. ON báze pak je

$$C = \left(\frac{1}{\sqrt{10}}(1,2,2,-1), \frac{1}{\sqrt{26}}(2,3,-3,2), \frac{1}{\sqrt{10}}(2,-1,-1,-2) \right)$$

Je-li $C = (w_1, \dots, w_n)$ ON báze V, pak $\forall u \in V$

$$u = P_V(u) = \sum_{i=1}^{n} \langle w_i, u \rangle w_i,$$

čili $[u]^C = (\langle w_1, u \rangle, \dots, \langle w_n, u \rangle)^T$. Takto vyjádřené souřadnice vektoru vůči ON bázi se nazývají jeho *Fourierovými koeficienty*. Platí pro ně *Parsevalova rovnost* ♣

$$\sum_{i=1}^{n} |\langle w_i, u \rangle|^2 = \|u\|^2,$$

tj. vyjádření normy na V pomocí standardní normy na $\mathbb{C}^n$. Podobně pro skalární součin na V a standardní skalární součin mezi aritmetickými vektory Fourierových koeficientů platí ♣

$$\sum_{i=1}^{n} \overline{\langle w_i, u \rangle} \langle w_i, v \rangle = \langle u, v \rangle$$

Chceme-li vektor $u := u_3 = (3, 2, 8, -7)$ vyjádřit vůči C, počítáme místo nehomogenní soustavy rovnic jen tři Fourierovy koeficienty:

$$\langle w_1, u\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\langle(1, 2, 2, -1), (3, 2, 8, -7)\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}30 = 3\sqrt{10},$$
$$\langle w_2, u\rangle = \frac{1}{\sqrt{26}}\langle(2, 3, -3, 2), (3, 2, 8, -7)\rangle = \frac{1}{\sqrt{26}}(-26) = -\sqrt{26},$$
$$\langle w_3, u\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}\langle(2, -1, -1, -2), (3, 2, 8, -7)\rangle = \frac{1}{\sqrt{10}}10 = \sqrt{10}$$

Otestujme, že platí i Parsevalova rovnost:

$$\|u\|^2 = 9 + 4 + 64 + 49 = 126$$
$$\sum_{i=1}^{3} |\langle w_i, u\rangle|^2 = 90 + 26 + 10 = 126$$

S GS-ortogonalizací úzce souvisí maticový rozklad, který patří k nejdůležitějším nástrojům numerické lineární algebry:

Věta (QR rozklad matice)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ *je matice s lineárně nezávislými sloupci. Pak existuje právě jedna dvojice matic* $Q \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $R \in \mathbb{C}^{n \times n}$, *která splňuje podmínky*

1. $A = QR$
2. *Sloupce* Q *tvoří ortonormální množinu vzhledem ke standardnímu skalárnímu součinu na* $\mathbb{C}^m$
3. R *je horní trojúhelníková s kladnými čísly na diagonále.*

Důkaz.

Označme $A = (\mathbf{a}_1|\dots|\mathbf{a}_n)$ a $(\mathbf{q}_1,\dots,\mathbf{q}_n)$ ON posloupnost vzniklou GS ortogonalizací z $(\mathbf{a}_1,\dots,\mathbf{a}_n)$. Položme $Q := (\mathbf{q}_1|\dots|\mathbf{q}_n)$. Vyjádření $\mathbf{a}_k$ pomocí Fourierových koeficientů $\mathbf{a}_k = \sum_{i=1}^{k}\langle\mathbf{q}_i,\mathbf{a}_k\rangle\mathbf{q}_i$ zapišme maticově jako

$$(\mathbf{a}_1|\dots|\mathbf{a}_n) = (\mathbf{q}_1|\dots|\mathbf{q}_n)\begin{pmatrix} \langle\mathbf{q}_1,\mathbf{a}_1\rangle & \langle\mathbf{q}_1,\mathbf{a}_2\rangle & \dots & \langle\mathbf{q}_1,\mathbf{a}_n\rangle \\ 0 & \langle\mathbf{q}_2,\mathbf{a}_2\rangle & \dots & \langle\mathbf{q}_2,\mathbf{a}_n\rangle \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \langle\mathbf{q}_n,\mathbf{a}_n\rangle \end{pmatrix}$$

Označme $\mathbf{q}'_k := \mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1}\langle\mathbf{q}_i,\mathbf{a}_k\rangle\mathbf{q}_i$ vektor OG báze, která vzniká v GS-algoritmu před normalizací. Pak

$$\langle\mathbf{q}_k,\mathbf{a}_k\rangle = \left\langle \mathbf{q}_k, \mathbf{q}'_k + \sum_{i=1}^{k-1}\langle\mathbf{q}_i,\mathbf{a}_k\rangle\mathbf{q}_i, \right\rangle = \langle\mathbf{q}_k,\mathbf{q}'_k\rangle = \|\mathbf{q}'_k\| > 0$$

Tím je dokázána existence Q a R. Jednoznačnost ♣. $\square$

Čtvercová matice s vlastností $U^+U = UU^+ = E$ se nazývá *unitární*. Příkladem je matice Q v QR rozkladu čtvercové matice A.

Věta

Nechť V je unitární prostor, $B = (v_1, \ldots, v_n)$, $C = (w_1, \ldots, w_n)$ jeho dvě ortonormální báze, pak matice přechodu $U := [\mathrm{Id}]_C^B$ je unitární.

Důkaz.

Z definice matice přechodu $w_k = \sum_{l=1}^n u_{lk} v_l$ a Parsevalova rovnost pro skalární součin pak dává

$$\delta_{kj} = \langle w_k, w_j \rangle = \sum_{i=1}^n \overline{u_{ik}} u_{ij} = \sum_{i=1}^n u_{ki}^+ u_{ij},$$

tedy $U^+U = E$. Protože U je čtvercová, tak i $UU^+ = E$. $\square$

- Řádky U tvoří ON bázi $\mathbb{C}^n$, sloupce také.
- $U^{-1} \equiv [\mathrm{Id}]^C_B = U^+$
- Pokud U je reálná, pak $U^T U = UU^T = E$. Taková matice se nazývá *ortogonální*.
- V transformační formuli pro matici endomorfismu $A := [f]^B_B$, $A' = [f]^C_C$ lze psát

$$A' = [\mathrm{Id}]^C_B [f]^B_B [\mathrm{Id}]^B_C = U^+ A U$$

  nebo v reálném případě $A' = U^T A U$. Pokud tedy pracujeme pouze v ON bázích, transformační formule pro endomorfismy a pro bilineární resp. seskvilineární formy splývají. Toho využijeme v příští přednášce o ortogonální diagonalizaci.