dr Izabella Czochralska
Instytut Ekonometrii SGH, Warszawa

Ortonormalizacja bazy przestrzeni unitarnej

Rozważamy *przestrzeń unitarną* $V(K)$ nad ciałem liczb zespolonych $K \subset Z$, z *iloczynem skalarnym* wektorów $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V(K)$ oznaczonym $(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) = g(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, gdzie $g : V \times V \to K$ jest dwuliniowym funkcjonałem hermitowskim, generującym dodatnio określoną formę hermitowską $h : V \to \mathbb{R}$. *Normą* wektora $\mathbf{x} \in V(K)$ jest oczywiście liczba $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{(\mathbf{x} \mid \mathbf{x})}$.

Macierz $\mathbf{G}[(\mathbf{v}_i \mid \mathbf{v}_j)]_{n \times n}$ iloczynu skalarnego w bazie $B = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \ldots, \mathbf{v}_n) \subset V(K)$ jest dodatnio określoną *macierzą hermitowską*, czyli spełnia zależność $\overline{\mathbf{G}} = \mathbf{G}^T$ (a konkretnie $\mathbf{G} = \overline{\mathbf{G}}^T$). Wtedy $(\mathbf{x} \mid \mathbf{y}) = \mathbf{x}_B^T \mathbf{G} \overline{\mathbf{y}}_B$, gdzie $\mathbf{x}_B, \mathbf{y}_B \in K^n$ są wektorami współrzędnych wektorów $\mathbf{x}$ i $\mathbf{y}$ w bazie B, odpowiednio. Podobnie też do własności dodatnio określonej macierzy symetrycznej spełnia pewne użyteczne warunki konieczne:

Twierdzenie. *Jeśli forma hermitowska h o macierzy hermitowskiej $\mathbf{G} = [a_{ij}]_{n \times n}$ jest dodatnio określona, to:*

- $\forall i \in \overline{1, n}\ a_{ii} > 0$;
- *największy co do wartości bezwzględnej element macierzy* $\mathbf{G}$ *leży na przekątnej i tylko tam — a w ogóle* $\forall i, j \in \overline{1, n},\ i \neq j\ |a_{ij}| < \max\{a_{ii}, a_{jj}\}$;
- $\forall i, j \in \overline{1, n},\ i \neq j\ |\mathrm{Re}\, a_{ij}| < \frac{a_{ii} + a_{jj}}{2}$;
- *dowolna podmacierz główna* $\mathbf{G}_k$ *stopnia* $k \in \overline{1, n}$ *(której przekątna jest podzbiorem przekątnej macierzy* $\mathbf{G}$*) jest też dodatnio określoną macierzą hermitowską, a jej dodatni wyznacznik jest minorem głównym — ma więc zastosowanie twierdzenie Sylvestera.*

Każda przestrzeń unitarna ma bazę *ortonormalną*. Dla macierzy hermitowskiej $\mathbf{G}$ istnieje bowiem taka nieosobliwa macierz trójkątna $\mathbf{P}$ z jedynkami na przekątnej, że $\mathbf{P}^T \mathbf{G} \overline{\mathbf{P}}$ jest macierzą diagonalną o rzeczywistych elementach diagonalnych, baza B ulega *ortogonalizacji* i $\mathbf{P}$ jest *macierzą przejścia* od bazy B do bazy ortogonalnej — unormowane wektory tworzą zaś bazę ortonormalną przestrzeni $V(K)$, którą można rozszerzyć do bazy ortonormalnej dowolnego wymiaru przestrzeni unitarnej $V'(K) \supset V(K)$.

Znana z literatury *ortogonalizacja Grama–Schmidta* (por. [2], [3]) wydaje się być niedoceniana. „*Zwięzły i elegancki algorytm Grama–Schmidta jest katastrofalnie numerycznie niestabilny*" — oto cytat z [2], s. 295.

Modyfikacja metody, związana z adaptacją algorytmu diagonalizacji z [1], czy pierwszej fazy zwykłej eliminacji Gaussa, może być zrealizowana z mniejszą złożonością obliczeniową i większą stabilnością, nawet w ogólnym przypadku przestrzeni unitarnej nad ciałem zespolonym i bez jawnego użycia macierzy przejścia $\mathbf{P}$.

Literatura

[1] I. Czochralska, *A verification of the definiteness of a quadratic form — its canonical form*, Badania Operacyjne i Decyzje 1 (1996), 3–26.
[2] A. Kiełbasiński, H. Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa*, WNT, Warszawa 1992.
[3] A. Mostowski, M. Stark, *Algebra liniowa*, PWN, Warszawa 1977.