

02_vectors

August 27, 2019

```
In [6]: import platform
        if platform.system() == 'Linux':
            %run '/home/jonas/Dropbox/GitHub/algebra_linear/init.ipynb'
        else:
            %run '/Users/jonasmaziero/Dropbox/GitHub/algebra_linear/init.ipynb'
```

1 Álgebra Linear

É o estudo de espaços vetoriais e de operações lineares nesses espaços. Já em sua versão mais básica, a AL tem aplicações diversas em ciência. Uma boa descrição sobre o motivo de definirmos um espaço vetorial, ou grupo, como o faremos, pode ser visto no playlist de álgebra abstrata da Socratica: https://youtu.be/IP7nW_hKB7I. Outro conjunto de vídeos interessantes sobre AL é o do 3Blue1Brown: <http://3b1b.co/eola>.

1.1 Espaço vetorial

Um conjunto de objetos $\{|v\rangle\}$, que chamaremos de vetores, forma um espaço vetorial V se existirem a operação de *soma de vetores* $+: V \times V \rightarrow V$, que leva dois vetores em um vetor de V , com as seguintes propriedades: * Comutatividade: $|v\rangle + |w\rangle = |w\rangle + |v\rangle, \forall |v\rangle, |w\rangle \in V$, * Associatividade: $|v\rangle + (|w\rangle + |x\rangle) = (|v\rangle + |w\rangle) + |x\rangle, \forall |v\rangle, |w\rangle, |x\rangle \in V$, * Existe o elemento nulo $|\emptyset\rangle$ tal que: $|v\rangle + |\emptyset\rangle = |v\rangle, \forall |v\rangle \in V$, * Existe o elemento inverso $|v^{-1}\rangle$ tal que: $|v\rangle + |v^{-1}\rangle = |\emptyset\rangle, \forall |v\rangle \in V$, e a operação de *multiplicação por escalar* $*: \mathbb{F} \times V \rightarrow V$, herdada da multiplicação do campo escalar \mathbb{F} e que leva um escalar do campo escalar associado e um vetor de V em um vetor de V , com as seguintes propriedades: * Se $\mathbb{1}_F$ é a identidade para a multiplicação em \mathbb{F} , então $\mathbb{1}_F * |v\rangle = |v\rangle, \forall |v\rangle \in V$, * Associatividade para produto dos escalares: $(a * b) * |v\rangle = a * (b * |v\rangle), \forall a, b \in \mathbb{F} \text{ e } \forall |v\rangle \in V$, * Distributividade para a soma dos vetores: $a * (|v\rangle + |w\rangle) = a * |v\rangle + a * |w\rangle, \forall a \in \mathbb{F} \text{ e } \forall |v\rangle, |w\rangle \in V$. * Distributividade para a soma de escalares: $(a + b) * |v\rangle = a * |v\rangle + b * |v\rangle \forall a, b \in \mathbb{F} \text{ e } |v\rangle \in V$.

1.1.1 Proposição

Seja $\mathbb{F} * a = a \forall a \in \mathbb{F}$. Então $\mathbb{F} * |v\rangle = |\emptyset\rangle \forall |v\rangle \in V$. ##### Verificação

$$\mathbb{F} * |v\rangle = \mathbb{F} * |v\rangle + |\emptyset\rangle = \mathbb{F} * |v\rangle + |v\rangle + |v^{-1}\rangle = \mathbb{F} * |v\rangle + \mathbb{1}_F * |v\rangle + |v^{-1}\rangle \quad (1)$$

$$= (\mathbb{F} + \mathbb{1}_F) * |v\rangle + |v^{-1}\rangle = \mathbb{1}_F * |v\rangle + |v^{-1}\rangle = |v\rangle + |v^{-1}\rangle \quad (2)$$

$$= |\emptyset\rangle. \quad (3)$$

Exemplos Para o conjunto de listas com n números complexos, denotado por \mathbb{C}^n , as operações de soma de vetores e de multiplicação por escalar são definidas por:

$$|v\rangle + |w\rangle := \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} v_1 + w_1 \\ v_2 + w_2 \\ \vdots \\ v_n + w_n \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$a * |v\rangle = a * \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} a * v_1 \\ a * v_2 \\ \vdots \\ a * v_n \end{bmatrix}, \quad (5)$$

com $a, v_j, w_k \in \mathbb{C}$ e $+$ e $*$ nas matrizes são as usuais operações de soma e multiplicação de números complexos. Aplicando as propriedades dessas operações, pode-se verificar que essas definições satisfazem as propriedades acima e tornam assim \mathbb{C}^n em um espaço vetorial. OBS: \mathbb{R}^n é um caso particular de \mathbb{C}^n , e é também um espaço vetorial.

Exercício: Forneça as conhecidas definições de soma e multiplicação por escalar que fazem de $\mathbb{C}^{n \times n}$ um espaço vetorial.

1.2 Combinação e independência linear

Dizemos que um vetor $|v\rangle \in V$, com V sendo um espaço vetorial, é uma *combinação linear* de um conjunto de vetores $|v_j\rangle \in V$ se existem escalares do campo escalar associado $a_j \in \mathbb{F}$ tais que

$$|v\rangle = \sum_j a_j |v_j\rangle. \quad (6)$$

Um conjunto de n vetores $\{|w_j\rangle\} \in V$ é um conjunto *linearmente independente* (LI) se nenhum desses vetores pode ser escrito como uma combinação linear dos outros. Colocado de outra forma, $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^n$ é LI se a única maneira de satisfazer a igualdade

$$\sum_j a_j |w_j\rangle = |\emptyset\rangle, \quad (7)$$

para $a_j \in \mathbb{F}$, é com todos os coeficientes da combinação linear nulos, i.e., $a_j = 0$ para $j = 1, \dots, n$.

OBS: Se um conjunto de vetores não é LI, então este é dito linearmente dependente (LD). Note que nesse caso existe pelo menos um coeficiente a_k não nulo, e podemos escrever $|w_k\rangle = \sum_{j \neq k} (-a_j/a_k) |w_j\rangle$.

Exemplos Para \mathbb{C}^2 temos que $|w_1\rangle = [i \ 1]^T$ e $|w_2\rangle = [3i \ 1]^T$ são LI. Já $|w_1\rangle$ e $|w_3\rangle = [3i \ 3]^T$ são LD pois $-3|w_1\rangle + |w_3\rangle = |\emptyset\rangle$.

1.2.1 Critério para determinar se um conjunto de vetores é LI

Lembrando, se só obtemos $\sum_{j=1}^n a_j |w_j\rangle = |\emptyset\rangle$ com $|a\rangle = [a_1 \ \dots \ a_n]^T = [0 \ \dots \ 0]^T = |\emptyset\rangle$, então o conjunto de vetores $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^n$ é LI, senão é LD. Vamos transformar essa equação em uma equação matricial definindo $|w_j\rangle = [w_{1,j} \ \dots \ w_{n,j}]^T$. Assim

$$|\oslash\rangle = \sum_{j=1}^n a_j |w_j\rangle = \sum_{j=1}^n a_j \begin{bmatrix} w_{1j} \\ \vdots \\ w_{nj} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^n \begin{bmatrix} a_j w_{1j} \\ \vdots \\ a_j w_{nj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^n w_{1j} a_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^n w_{nj} a_j \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$= \begin{bmatrix} w_{1,1} & \cdots & w_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{n,1} & \cdots & w_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} =: W|a\rangle. \quad (9)$$

Vemos assim que se a matriz

$$W = [|w_1\rangle \quad \cdots \quad |w_n\rangle] \quad (10)$$

possuir inversa, i.e., se $\det(W) \neq 0$, então

$$W|a\rangle = |\oslash\rangle \Rightarrow W^{-1}W|a\rangle = \mathbb{I}_n|a\rangle = |a\rangle = W^{-1}|\oslash\rangle = |\oslash\rangle, \quad (11)$$

o que implica que o conjunto de vetores é LI. Se tivermos $\det(W) = 0$ o conjunto de vetores é LD. *OBS:* Esse critério se torna óbvio se lembrarmos que o determinante de uma matriz é nulo se uma (ou mais) coluna(s) dessa matriz é uma combinação linear de outras das suas colunas. Essa fato equivale, no presente contexto, a um (ou mais) dos vetores $|w_j\rangle$ ser uma combinação linear de outros desses vetores.

Exemplos Considere o conjunto de vetores $\{|w_1\rangle = [2 \ 3]^T, |w_2\rangle = [5 \ 7]^T\}$. Teremos

$$\det(W) = \det[|w_1\rangle \quad |w_2\rangle] = \det \begin{bmatrix} 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} = -1 \neq 0. \quad (12)$$

Portanto $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle\}$ é LI.

Consideremos agora outro conjunto de vetores $\{|w_1\rangle = [2 \ 3]^T, |w_2\rangle = [5 \ 7]^T, |w_3\rangle = [11 \ 13]^T\}$. Teremos

$$\det(W) = \det[|w_1\rangle \quad |w_2\rangle \quad |w_3\rangle] = \det \begin{bmatrix} 2 & 5 & 11 \\ 3 & 7 & 13 \end{bmatrix}. \quad (13)$$

Como olhamos somente para o determinante de matrizes quadradas, vamos considerar esses vetores como sendo vetores de \mathbb{R}^3 com componentes não nulas somente em \mathbb{R}^2 , i.e., $\{|w'_1\rangle = [2 \ 3 \ 0]^T, |w'_2\rangle = [5 \ 7 \ 0]^T, |w'_3\rangle = [11 \ 13 \ 0]^T\}$. Nesse caso teríamos

$$\det(W') = \det[|w'_1\rangle \quad |w'_2\rangle \quad |w'_3\rangle] = \det \begin{bmatrix} 2 & 5 & 11 \\ 3 & 7 & 13 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = 0, \quad (14)$$

pela expansão em cofatores na última linha. Portanto $\{|w'_1\rangle, |w'_2\rangle, |w'_3\rangle\}$, e $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle, |w_3\rangle\}$, é LD. Esse resultado pode ser verificado usando $|w_3\rangle = \alpha|w_1\rangle + \beta|w_2\rangle$ e obtendo os coeficientes. Teremos

$$\begin{bmatrix} 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 13 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 11 \\ 13 \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -7 & 5 \\ 3 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 11 \\ 13 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -12 \\ 7 \end{bmatrix}. \quad (16)$$

```
In [5]: w1 = Matrix([[2],[3]]); w2 = Matrix([[5],[7]]); w3 = Matrix([[11],[13]])
        A = Matrix([[2,5],[3,7]]); Ai = A.inv(); Ai*w3
        -12*w1+7*w2 # verificação
```

Out [5]:

$$\begin{bmatrix} 11 \\ 13 \end{bmatrix}$$

Exercício: Verifique que $\{|w_1\rangle = [17 \ 19]^T, |w_2\rangle = [23 \ 29]^T\}$ é LI e que $\{|w_1\rangle = [17 \ 19]^T, |w_2\rangle = [23 \ 29]^T, |w_3\rangle = [31 \ 37]^T\}$ é LD.

1.2.2 Extensão

A extensão de um conjunto de vetores contidos em um espaço vetorial V , $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n \subseteq V$, são todos os vetores que são obtidos através de combinações lineares desse conjunto de vetores, i.e.,

$$\text{ext}(\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n) = \left\{ \sum_{j=1}^n a_j |v_j\rangle \text{ para } a_j \in \mathbb{F} \right\}. \quad (17)$$

Exemplo Considere $|v_1\rangle = [1 \ 0]^T$ e $|v_2\rangle = [0 \ 1]^T$. Como $|v\rangle = [a \ b]^T = a|v_1\rangle + b|v_2\rangle$, então $\text{ext}(|v_1\rangle, |v_2\rangle) = \mathbb{C}^2$.

Exercício: Qual é a extensão dos vetores $|w_1\rangle = [1 \ 1]^T$ e $|w_2\rangle = [1 \ -1]^T$?

1.3 Base

Se a extensão de um conjunto de vetores LI, $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n \subseteq V$, é todo o espaço vetorial, i.e.,

$$\text{ext}(\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n) = V, \quad (18)$$

dizemos que esse conjunto de vetores forma uma base pra esse espaço vetorial. *OBS:* Note que nesse caso qualquer vetor de V pode ser escrito como combinação linear de $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n$.

Exemplo Os vetores $|v_1\rangle$ e $|v_2\rangle$ do tópico anterior formam uma base para o espaço vetorial \mathbb{C}^2 .

Exercício: Os vetores $|w_1\rangle$ e $|w_2\rangle$ do tópico anterior formam uma base para o espaço vetorial \mathbb{C}^2 ?

1.4 Teorema

Seja $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^r$ um conjunto de vetores LI tal que $|v_j\rangle \in \text{ext}(\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s)$ para $j = 1, \dots, r$, com $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s$ sendo também um conjunto LI. Então $r \leq s$. ### Prova Pelo teorema, temos que cada vetor $|v_j\rangle$ pode ser escrito como uma combinação linear dos vetores do conjunto $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s$:

$$|v_j\rangle = \sum_{k=1}^s a_{j,k} |w_k\rangle, \quad (19)$$

para $j = 1, \dots, r$, com $a_{j,k} \in \mathbb{F}$. Vamos assumir que $r > s$ e verificar que isso nos leva a uma *contradição*. Todas as equações acima podem ser reescritas como uma única equação matricial:

$$\begin{bmatrix} |v_1\rangle \\ |v_2\rangle \\ \vdots \\ |v_s\rangle \\ |v_{s+1}\rangle \\ \vdots \\ |v_r\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & a_{s,s} \\ a_{s+1,1} & a_{s+1,2} & \cdots & a_{s+1,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r,1} & a_{r,2} & \cdots & a_{r,s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |w_1\rangle \\ |w_2\rangle \\ \vdots \\ |w_s\rangle \end{bmatrix} \quad (20)$$

Aplicando eliminação Gaussiana, podemos colocar o bloco de cima da matriz de coeficientes na forma "diagonal normalizada" (identidade). Lembrando, na eliminação Gaussiana trocamos uma linha por ela mais uma constante multiplicada por outra linha. Teremos assim

$$\begin{bmatrix} |v'_1\rangle \\ |v'_2\rangle \\ \vdots \\ |v'_s\rangle \\ |v_{s+1}\rangle \\ \vdots \\ |v_r\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ a_{s,1} & a_{s+1,2} & \cdots & a_{s+1,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r,1} & a_{r,2} & \cdots & a_{r,s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |w_1\rangle \\ |w_2\rangle \\ \vdots \\ |w_s\rangle \end{bmatrix}, \quad (21)$$

em que $\{v'_j\}_{j=1}^s$ são combinações lineares dos vetores $\{v_j\}_{j=1}^s$. Pode-se ver que os vetores $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^s$ não mudam pela eliminação Gaussiana pois para $j, l \in \{1, \dots, s\}$ e $c \in \mathbb{F}$,

$$|v_j\rangle \rightarrow |v_j\rangle + c|v_l\rangle \equiv \sum_{k=1}^s a_{j,k}|w_k\rangle + c \sum_{k=1}^s a_{l,k}|w_k\rangle = \sum_{k=1}^s (a_{j,k} + ca_{l,k})|w_k\rangle. \quad (22)$$

Depois de aplicado o procedimento da eliminação Gaussiana teremos

$$|v'_j\rangle = |w_j\rangle \text{ para } j = 1, \dots, s, \quad (23)$$

com (pelo processo de eliminação de Gauss)

$$|v'_j\rangle = \sum_{m=1}^s b_{j,m}|v_m\rangle \text{ para } b_{j,m} \in \mathbb{F}. \quad (24)$$

Podemos escrever as linhas para $n = s + 1, \dots, r$ como segue

$$|v_n\rangle = \sum_{k=1}^s a_{n,k}|w_k\rangle = \sum_{k=1}^s a_{n,k}|v'_k\rangle = \sum_{k=1}^s a_{n,k} \sum_{m=1}^s b_{k,m}|v_m\rangle = \sum_{m=1}^s \left(\sum_{k=1}^s a_{n,k} b_{k,m} \right) |v_m\rangle \quad (25)$$

$$= \sum_{m=1}^s c_{n,m}|v_m\rangle \quad (26)$$

com $c_{n,m} \in \mathbb{F}$. Chegamos assim na conclusão contraditória de que o conjunto $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^r$ é LD. Portanto nossa suposição de que $r > s$ deve estar errada e devemos ter que $r \leq s$.

Corolário Se $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^r$ e $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s$ são duas bases para um espaço vetorial, então $r = s$. ####
 Prova Como os dois conjuntos são bases, estes conjuntos são, individualmente, LI e cada vetor de um conjunto está na extensão do outro. Portanto, pelo teorema anterior, devemos ter $r \geq s$ e $s \geq r$, que somente são satisfeitas simultaneamente se $r = s$.

1.4.1 Dimensão

A dimensão de um espaço vetorial é definida como o número de seus vetores LI que são necessários para gerar todos os seus vetores. Ou seja, $\dim(V) = n$ se uma base de V tiver n vetores.

1.5 Produto interno

Uma função $\langle \cdot | \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{F}$ (leva dois vetores em um escalar) é uma função produto interno se satisfaz as seguintes propriedades: $\langle \cdot | \cdot \rangle$ é linear no segundo argumento, i.e., para $|v\rangle, |w_j\rangle \in V$ e $a_j \in \mathbb{F}$, devemos ter

$$\langle v | \left(\sum_j a_j |w_j\rangle \right) = \sum_j a_j \langle v | w_j \rangle. \quad (27)$$

- Antisimetria por troca dos vetores, i.e., para $|v\rangle, |w\rangle \in V$

$$\langle v | w \rangle = \langle w | v \rangle^*, \quad (28)$$

onde $*$ é o complexo conjugado.

- Positividade, i.e., para $|v\rangle \in V$

$$\langle v | v \rangle \geq 0 \text{ e } \langle v | v \rangle = 0 \Rightarrow |v\rangle = |\emptyset\rangle. \quad (29)$$

Exercício: Mostre que o produto interno é anti-linear no primeiro argumento, ou seja, se $|w\rangle = \sum_j a_j |w_j\rangle$ então

$$\langle w | v \rangle = \sum_j a_j^* \langle w_j | v \rangle. \quad (30)$$

Exercício: Usando as propriedades do produto interno, verifique que

$$|\langle v | w \rangle|^2 = |\langle w | v \rangle|^2. \quad (31)$$

Exemplo: \mathbb{C}^n Para este espaço vetorial o produto interno é definido por

$$\langle v | w \rangle := |v\rangle^\dagger |w\rangle = \begin{bmatrix} v_1^* & v_2^* & \cdots & v_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \quad (32)$$

$$= v_1^* w_1 + v_2^* w_2 + \cdots + v_n^* w_n = \sum_{j=1}^n v_j^* w_j. \quad (33)$$

```
In [55]: def inner_product(v,w):
          d = len(v)
          ip = 0
          for j in range(0,d):
              ip += conjugate(v[j])*w[j]
          return ip
```

```
In [57]: a,b,c,d = symbols("a b c d")
          v = [b,a]
          w = [c,d]
          inner_product(v,w)
```

Out [57]:

$$\bar{c}b + d\bar{a}$$

Exercício: Calcule o produto interno entre $|v_1\rangle = [1 \ i]^T$ e $|v_2\rangle = [1 \ -i]^T$.

Vamos *verificar* que essa definição possui as propriedades acima. Começamos considerando

$$|w\rangle = \sum_j a_j |w_j\rangle = \sum_j a_j \begin{bmatrix} |w_j\rangle_1 \\ |w_j\rangle_2 \\ \vdots \\ |w_j\rangle_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_j a_j |w_j\rangle_1 \\ \sum_j a_j |w_j\rangle_2 \\ \vdots \\ \sum_j a_j |w_j\rangle_n \end{bmatrix}. \quad (34)$$

Assim

$$\langle v|w\rangle = \sum_{k=1}^n v_k^* w_k = \sum_{k=1}^n v_k^* \sum_j a_j |w_j\rangle_k = \sum_j a_j \sum_{k=1}^n v_k^* |w_j\rangle_k = \sum_j a_j \langle v|w_j\rangle. \quad (35)$$

Agora

$$\langle w|v\rangle^* = \left(\sum_{j=1}^n w_j^* v_j \right)^* = \sum_{j=1}^n (w_j^* v_j)^* = \sum_{j=1}^n (w_j^*)^* v_j^* = \sum_{j=1}^n v_j^* w_j = \langle v|w\rangle. \quad (36)$$

Finalmente

$$\langle v|v\rangle = \sum_{j=1}^n v_j^* v_j = \sum_{j=1}^n |v_j|^2 \geq 0. \quad (37)$$

Para que essa soma seja nula, devemos ter todos os $v_j = 0$. Isso implicaria que $|v\rangle = |\odot\rangle$.

1.5.1 Traço

O traço de uma matriz é uma função $Tr : \mathbb{C}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{C}$ definida como a soma dos elementos na diagonal principal de uma matriz:

$$Tr(A) := \sum_{j=1}^n A_{j,j}. \quad (38)$$

```
In [41]: def trace(A):
        d = A.shape[0]
        tr = 0
        for j in range(0,d):
            tr += A[j,j]
        return tr

In [42]: A = Matrix([[a,b],[c,d]])
        trace(A)
```

Out[42]:

$$a + d$$

1.5.2 Produto interno de Hilbert-Schmidt

Essa é uma função $\langle \cdot | \cdot \rangle : \mathbb{C}^{m \times n} \times \mathbb{C}^{m \times n} \rightarrow \mathbb{C}$ definida como

$$\langle A | B \rangle := \text{Tr}(A^\dagger B) = \sum_{j=1}^n (A^\dagger B)_{j,j} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m (A^\dagger)_{j,k} B_{k,j} = \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^m A_{k,j}^* B_{k,j}. \quad (39)$$

```
In [37]: def inner_product_hs(A,B): # A=A(m,n), B=B(m,n)
        m = A.shape[0]; n = A.shape[1]
        ip = 0
        for j in range(0,n):
            for k in range(0,m):
                ip += conjugate(A[k,j])*B[k,j]
        return ip

In [40]: A = Matrix([[0,-1j],[1j,0]]); B = Matrix([[1,0],[0,-1]])
        inner_product_hs(A,B)
```

Out[40]:

$$0$$

Exercício: Calcule o produto interno de Hilbert-Schmidt entre as matrizes $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ e $B = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$. **Exercício:** Verificar que o produto interno de Hilbert-Schmidt satisfaz as propriedades listadas acima, para uma função ser um produto interno. **Exercício:** Verificar que para $n = 1$ o produto interno de Hilbert-Schmidt é equivalente ao produto interno para \mathbb{C}^m .

1.5.3 Ortogonalidade

Dois vetores $|v\rangle$ e $|w\rangle$ são ditos ortogonais se

$$\langle v | w \rangle = 0. \quad (40)$$

1.5.4 Norma

A norma ("tamanho") de um vetor $|v\rangle$ é definida como a raiz quadrada do produto interno do vetor com ele mesmo:

$$||v|| := \sqrt{\langle v|v\rangle}. \quad (41)$$

```
In [58]: def norm(v):
          d = len(v)
          return sqrt(inner_product(v,v))
```

```
In [60]: v = [1,2]
          norm(v)
```

Out[60]:

$$\sqrt{5}$$

```
In [45]: def norm_hs(A):
          d = A.shape[0]
          return sqrt(inner_product_hs(A,A))
```

```
In [46]: A = Matrix([[a,b],[c,d]])
          norm_hs(A)
```

Out[46]:

$$\sqrt{a\bar{a} + b\bar{b} + c\bar{c} + d\bar{d}}$$

Exercício: Calcule a norma do vetor $|v_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i \end{bmatrix}^T$. **Exercício:** Calcule a norma de Hilbert-Schmidt da matriz $B = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$.

1.6 Ortogonalização de Gram-Schmidt

Dado um conjunto de vetores LI $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n$, o procedimento de GS descrito abaixo pode ser utilizado para obtermos um conjunto $\{|w_j\rangle\}_{j=1}^n$ ortonormal, i.e., $\langle w_j|w_k\rangle = \delta_{j,k}$. O algoritmo é o seguinte: 1. Primeiro normalizamos $|v_1\rangle$, i.e., fazemos

$$|w_1\rangle := \frac{|v_1\rangle}{||v_1||}. \quad (42)$$

Assim

$$||w_1|| = \sqrt{\langle w_1|w_1\rangle} = \sqrt{\frac{\langle v_1|}{||v_1||} \frac{|v_1\rangle}{||v_1||}} = \sqrt{\frac{\langle v_1|v_1\rangle}{||v_1||^2}} = 1. \quad (43)$$

2. Agora subtraímos a "componente" que $|v_2\rangle$ possui na "direção" de $|w_1\rangle$ e normalizamos o vetor obtido, i.e.,

$$|w_2\rangle := \frac{|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle|w_1\rangle}{\|(|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle|w_1\rangle)\|}. \quad (44)$$

Esse vetor é normalizado e ortogonal a $|w_1\rangle$:

$$\langle w_1|w_2\rangle \propto \langle w_1|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle\langle w_1|w_1\rangle = 0. \quad (45)$$

3. Seguindo, subtraímos a "componente" que $|v_3\rangle$ possui na "direção" de $|w_1\rangle$ e de $|w_2\rangle$ e normalizamos o vetor obtido, i.e.,

$$|w_3\rangle := \frac{|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle|w_2\rangle}{\|(|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle|w_2\rangle)\|}. \quad (46)$$

Esse vetor é normalizado e ortogonal a $|w_1\rangle$ e a $|w_2\rangle$:

$$\langle w_1|w_3\rangle \propto \langle w_1|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle\langle w_1|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle\langle w_1|w_2\rangle = 0 \quad (47)$$

$$\langle w_2|w_3\rangle \propto \langle w_2|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle\langle w_2|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle\langle w_2|w_2\rangle = 0 \quad (48)$$

4. Para os outros $j = 4, \dots, n$ vetores, usa a mesma ideia, i.e., subtrai a componente na direção dos $|w_{k < j}\rangle$ e normaliza:

$$|w_j\rangle := \frac{|v_j\rangle - \sum_{k=1}^{j-1} \langle w_k|v_j\rangle|w_k\rangle}{\|(|v_j\rangle - \sum_{k=1}^{j-1} \langle w_k|v_j\rangle|w_k\rangle)\|}. \quad (49)$$

Abaixo está um programa que, fornecido o conjunto LI como as colunas de uma matrix A , este retorna o conjunto ortonormal nas colunas da matrix B .

```
In [49]: def gram_schmidt(A): # A=A[m,n], os vetores LI são colocados como colunas de A
    m = A.shape[0]; n = A.shape[1]
    B = zeros(m,n)
    B[:,0] = A[:,0]/norm(A[:,0])
    for j in range(1,n):
        B[:,j] = A[:,j]
        for k in range(0,j):
            B[:,j] -= inner_product(B[:,k],A[:,j])*B[:,k]
        B[:,j] /= norm(B[:,j])
    return B

In [52]: v1 = Matrix([[1],[1]]); v2 = Matrix([[1],[-1]])
A = zeros(2,2)
A[:,0] = v1[:,0]; A[:,1] = v2[:,0] # coloca os vetores como as colunas de A
gram_schmidt(A)
```

Out [52]:

$$\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & \frac{\sqrt{2}}{2} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}$$

Exercício: Use o procedimento de Gram-Schmidt para ortonormalizar $|v_1\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}^T$ e $|v_2\rangle = \begin{bmatrix} 1 & -1 \end{bmatrix}^T$.

2 Decomposição de um vetor em uma base ortonormal

Consideremos um vetor qualquer $|v\rangle \in V$ decomposto em uma base ortonormal $\{|b_j\rangle\}_{j=1}^{\dim V}$ para V como

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle, \quad (50)$$

com $v_j \in \mathbb{F}$. Teremos então que

$$\langle b_k | v \rangle = \langle b_k | \left(\sum_{j=1}^{\dim V} v_j |b_j\rangle \right) = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j \langle b_k | b_j \rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j \delta_{k,j} = v_k. \quad (51)$$

Ou seja,

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} \langle b_j | v \rangle |b_j\rangle. \quad (52)$$

2.1 Espaço de Hilbert

Consideraremos estes espaços como sendo espaços vetoriais munidos de uma função produto interno. O exemplo de espaço de Hilbert mais simples em Mecânica (MQ) é aquele usado para descrever "sistemas discretos":

$$\mathcal{H} = \left(\mathbb{C}^n, \langle \psi | \phi \rangle = |\psi\rangle^\dagger |\phi\rangle \right). \quad (53)$$

Já para tópicos avançados da MQ, tais como computação quântica, é comum usarmos

$$\mathcal{H} = \left(\mathbb{C}^{n \times n}, \langle A | B \rangle = \text{Tr}(A^\dagger B) \right). \quad (54)$$

Em ambos os casos aparece frequentemente o uso do espaço de funções

$$\mathcal{H} = \left(f, g : \mathbb{C}^n \rightarrow \mathbb{C}, \langle f(\vec{x}) | g(\vec{x}) \rangle = \int d\vec{x} f^\dagger(\vec{x}) g(\vec{x}) \right). \quad (55)$$

2.1.1 Desigualdade de Cauchy-Schwarz

Teorema Para quaisquer dois vetores $|v\rangle, |w\rangle \in \mathcal{H}$, segue que

$$\langle v | v \rangle \langle w | w \rangle \geq \langle v | w \rangle \langle w | v \rangle. \quad (56)$$

Prova Para provar essa desigualdade, utilizaremos a positividade do produto interno, i.e., $\langle x | x \rangle \geq 0 \forall |x\rangle \in \mathcal{H}$, com a definição apropriada para este vetor: $|x\rangle = |v\rangle + c|w\rangle$, com $c \in \mathbb{F}$. Teremos assim que

$$0 \leq \langle x | x \rangle = \langle |v\rangle + c|w\rangle, |v\rangle + c|w\rangle \rangle \quad (57)$$

$$= \langle v | v \rangle + c^* \langle w | v \rangle + c \langle v | w \rangle + c c^* \langle w | w \rangle. \quad (58)$$

Tendo em vista o que queremos provar, definiremos $c := -\langle w | v \rangle / \langle w | w \rangle$. Vem assim que

$$0 \leq \langle v|v \rangle - \frac{\langle w|v \rangle^*}{\langle w|w \rangle} \langle w|v \rangle - \frac{\langle w|v \rangle}{\langle w|w \rangle} \langle v|w \rangle + \frac{\langle w|v \rangle}{\langle w|w \rangle} \frac{\langle w|v \rangle^*}{\langle w|w \rangle} \langle w|w \rangle \quad (59)$$

$$= \langle v|v \rangle - \frac{|\langle w|v \rangle|^2}{\langle w|w \rangle} - \frac{|\langle w|v \rangle|^2}{\langle w|w \rangle} + \frac{|\langle w|v \rangle|^2}{\langle w|w \rangle^2} \langle w|w \rangle \quad (60)$$

$$= \langle v|v \rangle - \frac{|\langle w|v \rangle|^2}{\langle w|w \rangle}. \quad (61)$$

Multiplicando toda equação por $\langle w|w \rangle$ completaremos a verificação:

$$\langle v|v \rangle \langle w|w \rangle - |\langle v|w \rangle|^2 \geq 0. \quad (62)$$

Exercício: Mostre que a igualdade é obtida na desigualdade de Cauchy-Schwarz se e somente se os dois vetores forem proporcionais (i.e., se tiverem a mesma direção).

2.2 Subespaço vetorial

Se V é um espaço vetorial, então $W \subseteq V$ é um sub-espço de V se também for um espaço vetorial sob as operações de soma e multiplicação por escalar de V .

Exemplo: \mathbb{C}^2 é um subespaço de \mathbb{C}^3 .

Exercício: Forneça um exemplo de subespaço para o espaço vetorial $\mathbb{C}^{4 \times 4}$. Qual é a dimensão desse espaço vetorial? Qual é dimensão do subespaço que você escolheu como exemplo?