02_vectors

September 2, 2019

Notas de aula: Mecânica Quântica, Autor: Jonas Maziero, Departamento de Física, UFSM

```
In [1]: %run 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, que apresenta explicações gráficas sobre os conceitos de AL.

1.0.1 Corpo escalar

Dizemos que um conjunto $\mathbb{F}$ é um corpo escalar se estiverem definidas as operações de soma $+ : \mathbb{F}\text{x}\mathbb{F} \rightarrow \mathbb{F}$ e multiplicação $* : \mathbb{F}\text{x}\mathbb{F} \rightarrow \mathbb{F}$ com as seguintes propriedades: * Associatividade: $a + (b + c) = (a + b) + c$ e $a * (b * c) = (a * b) * c \quad \forall a, b, c \in \mathbb{F}$; * Comutatividade: $a + b = b + a$ e $a * b = b * a \quad \forall a, b \in \mathbb{F}$; * Elemento neutro: Existem $\mathbb{O}_{\mathbb{F}}$ e $\mathbb{1}_{\mathbb{F}}$ tais que $a + \mathbb{O}_{\mathbb{F}} = a$ e $\mathbb{1}_{\mathbb{F}} * a = a \quad \forall a \in \mathbb{F}$; * Elemento inverso: Existem $-a$ e a^{-1} tais que $a + (-a) = \mathbb{O}_{\mathbb{F}}$ e $a^{-1} * a = \mathbb{1}_{\mathbb{F}} \quad \forall a \in \mathbb{F}$; * Distributividade: $a * (b + c) = a * b + a * c \quad \forall a, b, c \in \mathbb{F}$.

Exemplo: $\mathbb{C}$ O cojunto $\mathbb{C}$, dos números complexos, é formado por elementos da forma $z = x + iy$ com $x, y \in \mathbb{R}$ e $i = \sqrt{-1}$. As operações de soma

$$z_1 + z_2 = (x_1 + iy_1) + (x_2 + iy_2) := (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2) \tag{1}$$

e de multiplicação

$$z_1 * z_2 = (x_1 + iy_1) * (x_2 + iy_2) := (x_1 * x_2 - y_1 * y_2) + i(x_1 * y_2 + y_1 * x_2) \tag{2}$$

fazem de $\mathbb{C}$ um corpo escalar (**exercício:** verifique).

1.1 Espaço vetorial

Um conjunto de objetos $\{|v\rangle\}$, que chamaremos de vetores, forma um espaço vetorial V se estiverem definidas as operações de *soma de vetores* $+ : V\text{x}V \rightarrow V$, 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 $|\oslash\rangle$ tal que: $|v\rangle + |\oslash\rangle = |v\rangle, \forall |v\rangle \in V$, * Existe o elemento inverso $|v^{-1}\rangle$ tal que: $|v\rangle + |v^{-1}\rangle = |\oslash\rangle, \forall |v\rangle \in V$, e a operação de *multiplicação por escalar* $* : \mathbb{F}\text{x}V \rightarrow V$, 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: $(a * b) * |v\rangle = a * (b * |v\rangle), \forall a, b \in \mathbb{F}$ e $\forall |v\rangle \in V$, * Distributividade para a soma dos vetores: $a * (|v\rangle + |w\rangle) = a * |v\rangle + a * |w\rangle, \forall a \in \mathbb{F}$ e $\forall |v\rangle, |w\rangle \in V$. * Distributividade para a soma de escalares: $(a + b) * |v\rangle = a * |v\rangle + b * |v\rangle \ \forall a, b \in \mathbb{F}$ e $|v\rangle \in V$.

Proposição Seja $\mathbb{O}_\mathbb{F} + a = a \ \forall a \in \mathbb{F}$. Então $\mathbb{O}_\mathbb{F} * |v\rangle = |\oslash\rangle \ \forall |v\rangle \in V$. ##### Verificação

$$\begin{aligned}
\mathbb{O}_\mathbb{F} * |v\rangle &= \mathbb{O}_\mathbb{F} * |v\rangle + |\oslash\rangle = \mathbb{O}_\mathbb{F} * |v\rangle + |v\rangle + |v^{-1}\rangle = \mathbb{O}_\mathbb{F} * |v\rangle + \mathbb{1}_\mathbb{F} * |v\rangle + |v^{-1}\rangle && (3)\\
&= (\mathbb{O}_\mathbb{F} + \mathbb{1}_\mathbb{F}) * |v\rangle + |v^{-1}\rangle = \mathbb{1}_\mathbb{F} * |v\rangle + |v^{-1}\rangle = |v\rangle + |v^{-1}\rangle && (4)\\
&= |\oslash\rangle. && (5)
\end{aligned}$$

1.2 Exemplos de espaços vetoriais

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:

$$|v\rangle + |w\rangle := \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} v_1 + w_1 \\ v_2 + w_2 \\ \vdots \\ v_n + w_n \end{bmatrix} \tag{6}$$

$$a * |v\rangle = a * \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} := \begin{bmatrix} a * v_1 \\ a * v_2 \\ \vdots \\ a * v_n \end{bmatrix}, \tag{7}$$

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 $\mathbb{C}^{n\text{x}n}$ um espaço vetorial.

1.3 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

$$|v\rangle = \sum_j a_j |v_j\rangle. \tag{8}$$

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

$$\sum_j a_j |w_j\rangle = |\oslash\rangle, \tag{9}$$

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

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 $|w_1\rangle = \begin{bmatrix} i & 1 \end{bmatrix}^T$ e $|w_2\rangle = \begin{bmatrix} 3i & 1 \end{bmatrix}^T$ são LI. Já $|w_1\rangle$ e $|w_3\rangle = \begin{bmatrix} 3i & 3 \end{bmatrix}^T$ são LD pois $-3|w_1\rangle + |w_3\rangle = |\oslash\rangle$.

1.3.1 Critério para determinar se um conjunto de vetores é LI

Lembrando, se só obtemos $\sum_{j=1}^{n} a_j|w_j\rangle = |\oslash\rangle$ com $|a\rangle = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T = |\oslash\rangle$, 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 $|w_j\rangle = \begin{bmatrix} w_{1,j} & \cdots & w_{n,j} \end{bmatrix}^T$. Assim

$$|\oslash\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j|w_j\rangle = \sum_{j=1}^{n} a_j \begin{bmatrix} w_{1j} \\ \vdots \\ w_{nj} \end{bmatrix} = \sum_{j=1}^{n} \begin{bmatrix} a_j w_{1j} \\ \vdots \\ a_j w_{nj} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{n} w_{1j}a_j \\ \vdots \\ \sum_{j=1}^{n} w_{nj}a_j \end{bmatrix} \tag{10}$$

$$= \begin{bmatrix} w_{1,1} & \cdots & w_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{n,1} & \cdots & w_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} =: W|a\rangle. \tag{11}$$

Vemos assim que se a matriz

$$W = \begin{bmatrix} |w_1\rangle & \cdots & |w_n\rangle \end{bmatrix} \tag{12}$$

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

$$W|a\rangle = |\oslash\rangle \Rightarrow W^{-1}W|a\rangle = \mathbb{I}_n|a\rangle = |a\rangle = W^{-1}|\oslash\rangle = |\oslash\rangle, \tag{13}$$

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 $\{|w_1\rangle = \begin{bmatrix} 2 & 3 \end{bmatrix}^T, |w_2\rangle = \begin{bmatrix} 5 & 7 \end{bmatrix}^T\}$. Teremos

$$\det(W) = \det \begin{bmatrix} |w_1\rangle & |w_2\rangle \end{bmatrix} = \det \begin{bmatrix} 2 & 5 \\ 3 & 7 \end{bmatrix} = -1 \neq 0. \tag{14}$$

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

Consideremos agora outro conjunto de vetores $\left\{|w_1\rangle = \begin{bmatrix}2 & 3\end{bmatrix}^T, |w_2\rangle = \begin{bmatrix}5 & 7\end{bmatrix}^T, |w_3\rangle = \begin{bmatrix}11 & 13\end{bmatrix}^T\right\}$. Teremos

$$\det(W) = \det\begin{bmatrix}|w_1\rangle & |w_2\rangle & |w_3\rangle\end{bmatrix} = \det\begin{bmatrix}2 & 5 & 11\\ 3 & 7 & 13\end{bmatrix}. \tag{15}$$

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., $\left\{|w_1'\rangle = \begin{bmatrix}2 & 3 & 0\end{bmatrix}^T, |w_2'\rangle = \begin{bmatrix}5 & 7 & 0\end{bmatrix}^T, |w_3'\rangle = \begin{bmatrix}11 & 13 & 0\end{bmatrix}^T\right\}$. Nesse caso teríamos

$$\det(W') = \det\begin{bmatrix}|w_1'\rangle & |w_2'\rangle & |w_3'\rangle\end{bmatrix} = \det\begin{bmatrix}2 & 5 & 11\\ 3 & 7 & 13\\ 0 & 0 & 0\end{bmatrix} = 0, \tag{16}$$

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

$$\begin{bmatrix}2 & 5\\ 3 & 7\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}11\\ 13\end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}2 & 5\\ 3 & 7\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}11\\ 13\end{bmatrix} \tag{17}$$

$$\Rightarrow \begin{bmatrix}\alpha\\ \beta\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-7 & 5\\ 3 & -2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}11\\ 13\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-12\\ 7\end{bmatrix}. \tag{18}$$

OBS: Note que a inclusão de uma componente nula não pode afetar se o conjunto de vetores é LD ou LI. E isso implica que um conjunto de vetores $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^m \in \mathbb{C}^n$ é LD se $m > n$.

```
In [2]: 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[2]:
```

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

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

1.3.2 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.,

$$ext(\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n) := \left\{\sum_{j=1}^n a_j|v_j\rangle \text{ para } a_j \in \mathbb{F}\right\}. \tag{19}$$

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

Exercício: Qual é a extensão dos vetores $|w_1\rangle = \begin{bmatrix}1 & 1\end{bmatrix}^T$ e $|w_2\rangle = \begin{bmatrix}1 & -1\end{bmatrix}^T$?

1.4 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.,

$$ext(\{|v_j\rangle\}_{j=1}^n) = V, \tag{20}$$

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 $\mathbb{C}^2$?

1.5 Teorema

Seja $\{|v_j\rangle\}_{j=1}^r$ um conjunto de vetores LI tal que $|v_j\rangle \in ext(\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s)$ para $j = 1, \cdots, r$, 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 $\{|w_k\rangle\}_{k=1}^s$:

$$|v_j\rangle = \sum_{k=1}^{s} a_{j,k}|w_k\rangle, \tag{21}$$

para $j = 1, \cdots, r$, com $a_{j,k} \in \mathbb{F}$. Vamos assumir que $r > s$ e verificar que isso nos leva a uma *contradição*. Segundo alguns matemáticos, prova por contradição é falta de imaginação, mas aqui nos contentaremos com esse tipo de demonstração. Todas as esquações acima podem ser reescritas como uma única equação matricial:

$$\begin{bmatrix} |v_1\rangle \\ |v_2\rangle \\ \vdots \\ |v_s\rangle \\ |v_{s+1}\rangle \\ \vdots \\ |v_r\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,s} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{s,1} & a_{s,2} & \cdots & a_{s,s} \\ a_{s,1} & a_{s+1,2} & \cdots & a_{s+1,s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{r,1} & a_{r,2} & \cdots & a_{r,s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |w_1\rangle \\ |w_2\rangle \\ \vdots \\ |w_s\rangle \end{bmatrix} \tag{22}$$

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

$$\begin{bmatrix} |v'_1\rangle \\ |v'_2\rangle \\ \vdots \\ |v'_s\rangle \\ |v_{s+1}\rangle \\ \vdots \\ |v_r\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \\ a_{s,1} & a_{s+1,2} & \cdots & a_{s+1,s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{r,1} & a_{r,2} & \cdots & a_{r,s} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |w_1\rangle \\ |w_2\rangle \\ \vdots \\ |w_s\rangle \end{bmatrix}, \tag{23}$$

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 $j, l \in \{1, \cdots, s\}$ e $c \in \mathbb{F}$,

$$|v_j\rangle \to |v_j\rangle + c|v_l\rangle \equiv \sum_{k=1}^{s} a_{j,k}|w_k\rangle + c\sum_{k=1}^{s} a_{l,k}|w_k\rangle = \sum_{k=1}^{s}(a_{j,k} + ca_{l,k})|w_k\rangle. \tag{24}$$

Depois de terminado o procedimento da eliminação Gaussinana teremos

$$|v'_j\rangle = |w_j\rangle \text{ para } j = 1, \cdots, s, \tag{25}$$

com (pelo processo de eliminação de Gauss)

$$|v'_j\rangle = \sum_{m=1}^{s} b_{j,m}|v_m\rangle \text{ para } b_{j,m} \in \mathbb{F}. \tag{26}$$

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

$$|v_n\rangle = \sum_{k=1}^{s} a_{n,k}|w_k\rangle = \sum_{k=1}^{s} a_{n,k}|v'_k\rangle = \sum_{k=1}^{s} a_{n,k}\sum_{m=1}^{s} b_{k,m}|v_m\rangle = \sum_{m=1}^{s}\left(\sum_{k=1}^{s} a_{n,k}b_{k,m}\right)|v_m\rangle \tag{27}$$

$$= \sum_{m=1}^{s} c_{n,m}|v_m\rangle \tag{28}$$

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 $r \leq s$, completando assim a prova do teorema.

1.5.1 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 $r = s$.

1.5.2 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.

1.6 Produto interno

Uma função $\langle\cdot|\cdot\rangle : V\text{x}V \to \mathbb{F}$ (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

$$\langle v| \left(\sum_j a_j |w_j\rangle \right) = \sum_j a_j \langle v|w_j\rangle. \tag{29}$$

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

  $$\langle v|w\rangle = (\langle w|v\rangle)^*, \tag{30}$$

  onde $*$ é o complexo conjugado.
- Positividade, i.e., para $|v\rangle \in V$

  $$\langle v|v\rangle \geq 0 \text{ e } \langle v|v\rangle = 0 \Rightarrow |v\rangle = |\oslash\rangle. \tag{31}$$

OBS. Usaremos com frequência a notação $\langle v|w\rangle \equiv (|v\rangle, |w\rangle)$ para o produto interno de dois vetores quaisquer.

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

$$\langle w|v\rangle = \sum_j a_j^* \langle w_j|v\rangle. \tag{32}$$

Exercício: Usando as propriedades do produto interno, verifique que

$$|\langle v|w\rangle|^2 = |\langle w|v\rangle|^2. \tag{33}$$

1.6.1 Exemplo: $\mathbb{C}^n$

Para este espaço vetorial o produto interno é definido por

$$\langle v|w\rangle := |v\rangle^\dagger |w\rangle = \begin{bmatrix} v_1^* & v_2^* & \cdots & v_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix} \tag{34}$$

$$= v_1^* w_1 + v_2^* w_2 + \cdots + v_n^* w_n = \sum_{j=1}^{n} v_j^* w_j. \tag{35}$$

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

$$|w\rangle = \sum_j a_j |w_j\rangle = \sum_j a_j \begin{bmatrix} |w_j\rangle_1 \\ |w_j\rangle_2 \\ \vdots \\ |w_j\rangle_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_j a_j |w_j\rangle_1 \\ \sum_j a_j |w_j\rangle_2 \\ \vdots \\ \sum_j a_j |w_j\rangle_n \end{bmatrix}. \tag{36}$$

Assim

$$\langle v|w\rangle = \sum_{k=1}^{n} v_k^* w_k = \sum_{k=1}^{n} v_k^* \sum_j a_j |w_j\rangle_k = \sum_j a_j \sum_{k=1}^{n} v_k^* |w_j\rangle_k = \sum_j a_j \langle v|w_j\rangle. \tag{37}$$

Agora

$$\langle w|v\rangle^* = \left(\sum_{j=1}^{n} w_j^* v_j\right)^* = \sum_{j=1}^{n} \left(w_j^* v_j\right)^* = \sum_{j=1}^{n} (w_j^*)^* v_j^* = \sum_{j=1}^{n} v_j^* w_j = \langle v|w\rangle. \tag{38}$$

Finalmente

$$\langle v|v\rangle = \sum_{j=1}^{n} v_j^* v_j = \sum_{j=1}^{n} |v_j|^2 \geq 0. \tag{39}$$

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

```
In [3]: 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 [4]: a,b,c,d = symbols("a b c d")
        v = [b,a]
        w = [c,d]
        inner_product(v,w)
```

Out[4]:

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

Exercício: Calcule o produto interno entre $|v_1\rangle = \begin{bmatrix}1 & i\end{bmatrix}^T$ e $|v_2\rangle = \begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}^T$.

1.7 Traço

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

$$Tr(A) := \sum_{j=1}^{n} A_{j,j}. \tag{40}$$

```
In [5]: def trace(A):
            d = A.shape[0]
            tr = 0
            for j in range(0,d):
                tr += A[j,j]
            return tr
```

```
In [6]: A = Matrix([[a,b],[c,d]])
        trace(A)
```

Out[6]:

$$a + d$$

1.8 Produto interno de Hilbert-Schmidt

Essa é uma função $\langle\cdot|\cdot\rangle_{hs} : \mathbb{C}^{mxn}\text{x}\mathbb{C}^{mxn} \to \mathbb{C}$ definida como

$$\langle A|B\rangle_{hs} := Tr(A^\dagger B) = \sum_{j=1}^{n}(A^\dagger B)_{j,j} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{m}(A^\dagger)_{j,k}B_{k,j} = \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{m}A^*_{k,j}B_{k,j}. \tag{41}$$

```
In [7]: 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 [8]: A = Matrix([[0,-1j],[1j,0]]);  B = Matrix([[1,0],[0,-1]])
        inner_product_hs(A,B)
```

Out[8]:

$$0$$

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 $n = 1$, e $m \in \mathbb{N}_+$, o produto interno de Hilbert-Schmidt é equivalente ao produto interno para $\mathbb{C}^m$.

1.8.1 Ortogonalidade

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

$$\langle v|w\rangle = 0. \tag{42}$$

Exemplos: Os vetores $|v\rangle = \begin{bmatrix} 1 & i \end{bmatrix}^T$ e $|w\rangle = \begin{bmatrix} 1 & -i \end{bmatrix}^T$ são ortogonais pois

$$\langle v|w\rangle = |v\rangle^\dagger|w\rangle = \begin{bmatrix} 1 & -i \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} = 1 + i^2 = 1 - 1 = 0. \tag{43}$$

Já os vetores $|x\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}^T$ e $|y\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}^T$ não são ortogonais pois

$$\langle x|y\rangle = |x\rangle^\dagger|y\rangle = \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = 1 \neq 0. \tag{44}$$

1.8.2 Norma

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

$$||v|| := \sqrt{\langle v|v\rangle}. \tag{45}$$

Exemplos: Para $|v\rangle \in \mathbb{C}^n$ teremos

$$||v|| = \sqrt{\langle v|v\rangle} = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} v_j^* v_j} = \sqrt{\sum_{j=1}^{n} |v_j|^2}. \tag{46}$$

Já para $|A\rangle \in \mathbb{C}^{mxn}$ teremos

$$||A||_{hs} = \sqrt{\langle A|A\rangle_{hs}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} A_{j,k}^* A_{j,k}} = \sqrt{\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n} |A_{j,k}|^2}. \tag{47}$$

```
In [9]: def norm(v):
            d = len(v)
            return sqrt(inner_product(v,v))
```

```
In [10]: v = [1,2]
         norm(v)
```

Out[10]:

$$\sqrt{5}$$

```
In [11]: def norm_hs(A):
             d = A.shape[0]
             return sqrt(inner_product_hs(A,A))
```

```
In [12]: A = Matrix([[a,b],[c,d]])
         norm_hs(A)
```

Out[12]:

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

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 $B = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$.

1.9 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

$$|w_1\rangle := \frac{|v_1\rangle}{||v_1||}. \tag{48}$$

Assim

$$||w_1|| = \sqrt{\langle w_1|w_1\rangle} = \sqrt{\frac{\langle v_1|}{||v_1||}\frac{|v_1\rangle}{||v_1||}} = \sqrt{\frac{\langle v_1|v_1\rangle}{||v_1||^2}} = \sqrt{\frac{||v_1||^2}{||v_1||^2}} = 1. \tag{49}$$

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

$$|w_2\rangle := \frac{|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle|w_1\rangle}{||(|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle|w_1\rangle)||}. \tag{50}$$

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

$$\langle w_1|w_2\rangle \propto \langle w_1|v_2\rangle - \langle w_1|v_2\rangle\langle w_1|w_1\rangle = 0. \tag{51}$$

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.,

$$|w_3\rangle := \frac{|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle|w_2\rangle}{||(|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle|w_2\rangle)||}. \tag{52}$$

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

$$\langle w_1|w_3\rangle \propto \langle w_1|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle\langle w_1|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle\langle w_1|w_2\rangle = 0 \tag{53}$$
$$\langle w_2|w_3\rangle \propto \langle w_2|v_3\rangle - \langle w_1|v_3\rangle\langle w_2|w_1\rangle - \langle w_2|v_3\rangle\langle w_2|w_2\rangle = 0 \tag{54}$$

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

$$|w_j\rangle := \frac{|v_j\rangle - \sum_{k=1}^{j-1}\langle w_k|v_j\rangle|w_k\rangle}{||(|v_j\rangle - \sum_{k=1}^{j-1}\langle w_k|v_j\rangle|w_k\rangle)||}. \tag{55}$$

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

```
In [13]: 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 [14]: 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[14]:

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

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

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle, \tag{56}$$

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

$$\langle b_k|v\rangle = \langle b_k|(\sum_{j=1}^{\dim V} v_j|b_j\rangle) = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j\langle b_k|b_j\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} v_j\delta_{k,j} = v_k. \tag{57}$$

Ou seja,

$$|v\rangle = \sum_{j=1}^{\dim V} \langle b_j|v\rangle|b_j\rangle. \tag{58}$$

Exercício: Quais são os coeficientes da expansão do vetor $|v\rangle = \begin{bmatrix}a & b\end{bmatrix}^T$ na base $\left\{|b_1\rangle = 2^{-1/2}\begin{bmatrix}1 & i\end{bmatrix}^T, |b_2\rangle = 2^{-1/2}\begin{bmatrix}1 & -i\end{bmatrix}^T\right\}$?

Exercício: Quais são os coeficientes da expansão da matriz $A = \begin{bmatrix}a & b \\ c & d\end{bmatrix}$ na base $\left\{\Gamma_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & 1\end{bmatrix}, \Gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & 1 \\ 1 & 0\end{bmatrix}, \Gamma_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}0 & -i \\ i & 0\end{bmatrix}, \Gamma_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & -1\end{bmatrix}\right\}$?

OBS. Use os códigos fornecidos acima para facilitar a resolução desses dois exercícios.

2.1 Espaço de Hilbert (=espaço vetorial + produto interno)

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":

$$\mathcal{H} = \left(\mathbb{C}^n, \langle\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle^\dagger|\phi\rangle\right). \tag{59}$$

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

$$\mathcal{H} = \left(\mathbb{C}^{nxn}, \langle A|B\rangle = Tr(A^\dagger B)\right). \tag{60}$$

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

$$\mathcal{H} = \left(f, g : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}, \langle f(\vec{x})|g(\vec{x})\rangle = \int d\vec{x} f^*(\vec{x})g(\vec{x})\right). \tag{61}$$

2.2 Desigualdade de Cauchy-Schwarz

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

$$\langle v|v\rangle\langle w|w\rangle \geq \langle v|w\rangle\langle w|v\rangle. \tag{62}$$

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

$$\begin{aligned} 0 \leq \langle x|x\rangle &= (|v\rangle + c|w\rangle, |v\rangle + c|w\rangle) && (63)\\ &= \langle v|v\rangle + c^*\langle w|v\rangle + c\langle v|w\rangle + cc^*\langle w|w\rangle. && (64)\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} 0 &\leq \langle v|v\rangle - \frac{\langle w|v\rangle^*}{\langle w|w\rangle}\langle w|v\rangle - \frac{\langle w|v\rangle}{\langle w|w\rangle}\langle v|w\rangle + \frac{\langle w|v\rangle}{\langle w|w\rangle}\frac{\langle w|v\rangle^*}{\langle w|w\rangle}\langle w|w\rangle && (65)\\ &= \langle v|v\rangle - \frac{|\langle w|v\rangle|^2}{\langle w|w\rangle} - \frac{|\langle w|v\rangle|^2}{\langle w|w\rangle} + \frac{|\langle w|v\rangle|^2}{\langle w|w\rangle^2}\langle w|w\rangle && (66)\\ &= \langle v|v\rangle - \frac{|\langle w|v\rangle|^2}{\langle w|w\rangle}. && (67)\end{aligned}$$

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

$$\langle v|v\rangle\langle w|w\rangle - |\langle v|w\rangle|^2 \geq 0. \tag{68}$$

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: $|v\rangle = \beta|w\rangle$ com $\beta \in \mathbb{F}$).

2.3 Subespaço vetorial

Se V é um espaço vetorial, então $W \subseteq V$ é um sub-espaço de V se também for um espaço vetorial sob as (mesmas) 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?