Унитарное пространство

Определение унитарного пространства

Определение 11.1.1	Пусть в комплексном линейном пространстве U каждой упорядоченной паре элементов a и b поставлено в соответствие комплексное число $\langle a\|b\rangle$, называемое их скалярным произведением, так, что выполнены аксиомы: $1^\circ.\ \langle a\|b\rangle = \overline{\langle b\|a\rangle}$; $2^\circ.\ \langle \lambda a\|b\rangle = \overline{\lambda}\,\langle a\|b\rangle$; $3^\circ.\ \langle a_1 + a_2\|b\rangle = \langle a_1\|b\rangle + \langle a_2\|b\rangle$; $4^\circ.\ \langle a\|a\rangle$ — вещественное неотрицательное число, причем $\langle a\|a\rangle = 0 \iff a = o$, тогда говорят, что задано *унитарное пространство.*

Для обозначения скалярного произведения в унитарном пространстве используются не круглые скобки, принятые в евклидовом пространстве, а скобки типа «брэкет»: $\langle\ ,\ \rangle$.

Замечание 11.1.1. Вид аксиомы 1° позволяет избежать проблемы, которая возникает в случае использования евклидовского правила коммутативности (т.е. пункта 1 определения 10.1.1) скалярного произведения для комплексных линейных пространств.

Действительно, если принять, что $\langle a|b\rangle = \langle b|a\rangle$, то $\langle a|\lambda b\rangle = \overline{\lambda}\,\langle a|b\rangle$, и очевидно, что при некотором ненулевом a и $\lambda = i$:

$$\langle ia|ia\rangle = \overline{i}\,\overline{i}\,\langle a|a\rangle = (-i)\,(-i)\,\langle a|a\rangle = -\,\langle a|a\rangle \ ,$$

но тогда число либо $\langle ia|ia\rangle$, либо $\langle a|a\rangle$ не положительно, что противоречит аксиоме 4°.

В случае же равенства $\langle a|b\rangle = \overline{\langle b|a\rangle}$ вынос λ из второго сомножителя скалярного произведения выполняется иначе:

$$\langle a|\lambda b\rangle = \overline{\langle \lambda b|a\rangle} = \overline{\overline{\lambda}\,\langle b|a\rangle} = \overline{\overline{\lambda}}\,\overline{\langle b|a\rangle} = \lambda\,\langle a|b\rangle \ ,$$

поскольку $\overline{\overline{\lambda}} = \lambda$. Это в рассматриваемом примере приводит к равенству $\langle ia|ia\rangle = \overline{i}\,i\,\langle a|a\rangle = \langle a|a\rangle$, которое согласуется с аксиомой 4°.

Пример 11.1.1

1°. Пространство n-мерных столбцов

$$a = \| \, \xi_1, \, \xi_2, \, \ldots, \, \xi_n \, \|^{\mathrm{T}} \qquad b = \| \, \eta_1, \, \eta_2, \, \ldots, \, \eta_n \, \|^{\mathrm{T}} \, ,$$

где $\xi_j, \, \eta_j \quad \forall j = [1, n]$ — комплексные числа, со скалярным произведением, определяемым по формуле

$$\langle a | b \rangle = \sum_{j=1}^{n} \overline{\xi}_j \eta_j ,$$

является унитарным.

2°. Унитарным будет пространство непрерывных на $[\alpha, \beta]$ комплекснозначных функций вещественного аргумента со скалярным произведением:

$$\langle a | b \rangle = \int\limits_{\alpha}^{\beta} \overline{a}(\tau) b(\tau) \, d\tau \, .$$

В унитарных пространствах, как правило, существуют аналоги определений и теорем, справедливых для евклидова пространства. Например, *неравенство Коши – Буняковского* будет иметь следующий вид $\langle a|a\rangle\,\langle b|b\rangle \geq \langle a|b\rangle\,\langle b|a\rangle$. Действительно,

$$\langle a|a\rangle\,\langle b|b\rangle \geq |\langle a|b\rangle|^2 = \langle a|b\rangle\,\overline{\langle a|b\rangle} = \langle a|b\rangle\,\langle b|a\rangle\ .$$

В конечномерном унитарном пространстве U^n произвольный базис $\{\,g_1,\,g_2,\,\ldots,\,g_n\,\}$ при необходимости может быть ортогонализирован по схеме Грама – Шмидта.

Выражение для скалярного произведения в координатах аналогично соответствующей формуле в евклидовом пространстве:

$$\langle x|y\rangle = \overline{\|x\|}_g^{\mathrm{T}}\,\|\Gamma\|_g\,\|y\|_g =$$

$$= \left\|\,\bar{\xi}_1\,\bar{\xi}_2\,\ldots\bar{\xi}_n\,\right\| \left\|\begin{array}{cccc} \langle g_1|g_1\rangle & \langle g_1|g_2\rangle & \ldots & \langle g_1|g_n\rangle \\ \langle g_2|g_1\rangle & \langle g_2|g_2\rangle & \ldots & \langle g_2|g_n\rangle \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \langle g_n|g_1\rangle & \langle g_n|g_2\rangle & \ldots & \langle g_n|g_n\rangle \end{array}\right\| \left\|\begin{array}{c} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \ldots \\ \eta_n \end{array}\right\|,$$

где $\|x\|_g$ и $\|y\|_g$ — координатные представления (столбцы) элементов x и y в базисе $\{\,g_1,\,g_2,\,\ldots,\,g_n\,\}$ и где $\|\Gamma\|_g$ — базисная матрица Грама в унитарном пространстве U^n. Заметим, что поскольку $\langle g_i|g_j\rangle = \overline{\langle g_j|g_i\rangle}$, то имеет место равенство $\|\Gamma\|_g^{\mathrm{T}} = \overline{\|\Gamma\|}_g$.

Определение 11.1.2	Матрица $\lVert R\rVert$, удовлетворяющая соотношению $\lVert R\rVert^{\mathrm{T}} = \overline{\lVert R\rVert}$, называется *эрмитовой*. Матрица $\lVert Q\rVert$, удовлетворяющая соотношениям $\lVert Q\rVert^{\mathrm{T}}\overline{\lVert Q\rVert} = \lVert E\rVert$ и $\overline{\lVert Q\rVert}\lVert Q\rVert^{\mathrm{T}} = \lVert E\rVert$, называется *унитарной*.

Определитель унитарной матрицы есть комплексное число, модуль которого равен единице. Действительно, согласно определению 11.1.2,

$$\det\left(\lVert Q\rVert^{\mathrm{T}}\overline{\lVert Q\rVert}\right) = \det\lVert Q\rVert^{\mathrm{T}}\det\overline{\lVert Q\rVert} = \det\lVert Q\rVert^{\mathrm{T}}\,\overline{\det\lVert Q\rVert} =$$

$$= \left|\det\lVert Q\rVert\right|^2 = \det\lVert E\rVert = 1\,.$$

Линейные операторы в унитарном пространстве

Для унитарного пространства имеются определения, аналогичные введенным для линейных операторов в главе 10.

В данном параграфе будут рассмотрены лишь специфические особенности линейных операторов, действующих в унитарном пространстве.

Определение 11.2.1	Линейный оператор $\hat{Q}$, действующий в унитарном пространстве U, называется *унитарным* (или *изометрическим*), если $\forall a, b \in U$ имеет место равенство $\left\langle \hat{Q}a \middle| \hat{Q}b \right\rangle = \langle a \| b \rangle$.

Замечание 11.2.1. Унитарный линейный оператор, действующий в конечномерном унитарном пространстве , в ортонормированном базисе имеет унитарную матрицу.

Определение 11.2.2	Линейный оператор $\hat{A}^{+}$, действующий в унитарном пространстве U, называется эрмитово сопряженным линейному оператору $\hat{A}$, если $\forall a, b \in U$ имеет место равенство $\left\langle \hat{A}a \middle| \hat{b} \right\rangle = \left\langle a \middle| \hat{A}^{+}b \right\rangle$.

Теорема 11.2.1 **Для линейных операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, действующих в унитарном пространстве U, справедливы соотношения:** $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$ **и** $\left(\lambda\hat{A}\right)^{+} = \overline{\lambda}\hat{A}^{+}$**.**

Доказательство.

Докажем первое соотношение. $\forall a, b \in U$ имеет место равенство

$$\left\langle \left(\hat{A}\hat{B}\right) a|\hat{b}\right\rangle = \left\langle \hat{B}a|\hat{A}^{+}b\right\rangle = \left\langle a|\hat{B}^{+}\hat{A}^{+}b\right\rangle .$$

Откуда по определению 11.2.2 имеем, что $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$.

Аналогично, $\forall a, b \in U$

$$\left\langle \left(\lambda\hat{A}\right) a|\hat{b}\right\rangle = \overline{\lambda}\left\langle \hat{A}a|b\right\rangle = \overline{\lambda}\left\langle a|\hat{A}^{+}b\right\rangle = \left\langle a|\overline{\lambda}\hat{A}^{+}b\right\rangle .$$

для любого комплексного числа λ.

Теорема доказана.

Для эрмитово сопряженных операторов, действующих в конечномерном пространстве U^n, имеет место

Теорема 11.2.2 **Матрица оператора $\hat{A}^{+}$, эрмитово сопряженного оператору $\hat{A}$ в U^n, в базисе $\{ g_1, g_2, \ldots, g_n \}$ определяется соотношением** $\left\|\hat{A}^{+}\right\|_g = \|\Gamma\|_g^{-1}\overline{\left\|\hat{A}\right\|_g}^{\mathrm{T}}\|\Gamma\|_g$**.**

Доказательство этой теоремы аналогично выводу формулы (10.6.1) для евклидова пространства.

Эрмитовы операторы

Определение 11.3.1	Линейный оператор $\hat{R}$, действующий в унитарном пространстве U, называется *эрмитово самосопряженным* (или просто *эрмитовым*), если $\hat{R}^{+} = \hat{R}$.

Эрмитов оператор, действующий в унитарном пространстве, обладает свойствами, аналогичными свойствам самосопряженного оператора в евклидовом пространстве. В частности:

1°. Собственные значения эрмитова оператора вещественны.

2°. Собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям эрмитова оператора, ортогональны.

3°. Для каждого эрмитова оператора в U^n существует ортонормированный базис, состоящий из его собственных векторов.

4°. В любом ортонормированном базисе унитарного пространства U^n эрмитов оператор имеет эрмитову матрицу.

Определение 11.3.2	Собственное значение λ линейного оператора $\hat{A}$ называется *вырожденным*, если отвечающее ему собственное подпространство имеет размерность больше единицы.

Приведем формулировки и обоснование наиболее важных свойств эрмитовых операторов.

Теорема 11.3.1 **Два эрмитовых оператора $\hat{R}$ и $\hat{S}$ имеют общую систему собственных векторов в U^n тогда и только тогда, когда эти операторы коммутируют, то есть когда $\hat{R}\hat{S} = \hat{S}\hat{R}$.**

Доказательство.

Докажем необходимость.

Пусть $\hat{R}a = \lambda a$ и $\hat{S}a = \mu a$, тогда

$$\hat{S}\hat{R}a = \hat{S}\lambda a = \lambda\hat{S}a = \lambda\mu a, \qquad \hat{R}\hat{S}a = \hat{R}\mu a = \mu\hat{R}a = \mu\lambda a$$

и, вычитая почленно, получим, что $\left(\hat{R}\hat{S} - \hat{S}\hat{R}\right)a = o$.

Поскольку элемент a — произвольный собственный вектор, то данное соотношение верно и для всей совокупности собственных векторов, а значит, и для любого элемента в U^n, так как из собственных векторов можно образовать базис. Поэтому $\hat{R}\hat{S} - \hat{S}\hat{R} = \hat{O}$.

Докажем достаточность.

Пусть самосопряженные операторы $\hat{R}$ и $\hat{S}$ коммутируют и пусть, кроме того, $\hat{R}a = \lambda a$.

Рассмотрим здесь лишь случай, когда все собственные значения оператора $\hat{R}$ различны.

Покажем, что элемент евклидова пространства $b = \hat{S}a$ является собственным вектором оператора $\hat{R}$. Действительно, в силу $\hat{R}\hat{S} = \hat{S}\hat{R}$ имеем

$$\hat{R}b = \hat{R}\hat{S}a = \hat{S}\hat{R}a = \hat{S}\lambda a = \lambda\hat{S}a = \lambda b\,.$$

С другой стороны, если все собственные значения кратности единица, то λ — это собственное значение, которое отвечает a и b одновременно. Поэтому $b = \kappa a$, и из $b = \hat{S}a$ следует $\hat{S}a = \kappa a$. Значит, a — собственный вектор оператора $\hat{S}$.

Теорема доказана.

Теорема 11.3.2 (о вырождении)

Если эрмитов оператор $\hat{A}$ коммутирует с каждым из двух некоммутирующих между собой эрмитовых операторов $\hat{B}$ и $\hat{C}$, то все собственные значения оператора $\hat{A}$ вырожденные.

Доказательство.

Пусть Ω — линейная оболочка элемента f — является одномерным собственным подпространством оператора $\hat{A}$, отвечающим его собственному значению λ кратности единица. То есть предположим, что $\dim \Omega = 1$.
Из коммутируемости операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$ (по теореме 11.3.1) имеем, что $\hat{B}f = \mu f$, а из коммутируемости $\hat{A}$ и $\hat{C}$ следует, что $\hat{C}f = \kappa f$. Но тогда в силу $\hat{A}f = \lambda f$ справедливы равенства

$$\hat{A}\hat{B}f = \hat{B}\hat{A}f = \lambda\mu f \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{C}\hat{B}\hat{A}f = \hat{C}\hat{B}\big(\lambda f\big) = \lambda\mu\kappa f$$

$$\hat{A}\hat{C}f = \hat{C}\hat{A}f = \lambda\kappa f \qquad \Longrightarrow \qquad \hat{B}\hat{C}\hat{A}f = \hat{B}\hat{C}\big(\lambda f\big) = \lambda\mu\kappa f$$

Из этих равенств получаем, что

$$\left(\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C}\right)\lambda f = o \qquad \forall f \in \Omega\,,$$

то есть $\hat{C}\hat{B} - \hat{B}\hat{C} = \hat{O}$, и, значит, операторы $\hat{B}$ и $\hat{C}$ коммутируют.

Но последнее утверждение противоречит условию теоремы, и, следовательно, необходимо допустить существование более чем одного линейно независимого элемента в Ω.

Теорема доказана.

Т а б л и ц а 11.3.1а

Евклидово пространство	**Унитарное пространство**
Правило выноса константы из первого сомножителя в скалярном произведении: $(\lambda a, b) = \lambda (a, b)$	Правило выноса константы из первого сомножителя в скалярном произведении: $\langle \lambda a \vert b \rangle = \overline{\lambda} \langle a \vert b \rangle$
Ортогональный оператор $\hat{Q}$: $(\hat{Q}a, \hat{Q}b) = (a, b) \quad \forall a, b \in E$	Унитарный оператор $\hat{Q}$: $\left\langle \hat{Q}a \vert \hat{Q}b \right\rangle = \langle a \vert b \rangle \quad \forall a, b \in U$
Ортогональная матрица $\Vert A\Vert$: $\Vert A\Vert^{\mathrm{T}} \Vert A\Vert = \Vert E\Vert$	Унитарная матрица $\Vert A\Vert$: $\overline{\Vert A\Vert}^{\mathrm{T}} \Vert A\Vert = \Vert E\Vert$

Таблица 11.3.1b

Евклидово пространство	**Унитарное пространство**
В ортонормированном базисе в E^n ортогональный оператор имеет ортогональную матрицу	В ортонормированном базисе в U^n унитарный оператор имеет унитарную матрицу
Сопряженный оператор $\hat{A}^+$: $$(\hat{A}a, b) = (a, \hat{A}^+ b) \quad \forall a, b \in E$$	Эрмитово сопряженный оператор $\hat{A}^+$: $$\left\langle \hat{A}a \middle\vert b \right\rangle = \left\langle a \middle\vert \hat{A}^+ b \right\rangle \quad \forall a, b \in U$$
В E^n сопряженный оператор имеет матрицу $$\left\Vert \hat{A}^+ \right\Vert_g = \Vert \Gamma \Vert_g^{-1} \left\Vert \hat{A} \right\Vert_g^{\mathrm{T}} \Vert \Gamma \Vert_g$$	В U^n эрмитово сопряженный оператор имеет матрицу $$\left\Vert \hat{A}^+ \right\Vert_g = \Vert \Gamma \Vert_g^{-1} \overline{\left\Vert \hat{A} \right\Vert_g}^{\mathrm{T}} \Vert \Gamma \Vert_g$$
Самосопряженный оператор $\hat{R}$: $$(\hat{R}a, b) = (a, \hat{R}b) \quad \forall a, b \in E$$	Эрмитово самосопряженный оператор $\hat{R}$: $$\left\langle \hat{R}a \middle\vert b \right\rangle = \left\langle a \middle\vert \hat{R}b \right\rangle \quad \forall a, b \in U$$
Симметрическая матрица $\Vert A \Vert$: $$\Vert A \Vert^{\mathrm{T}} = \Vert A \Vert$$	Эрмитова матрица $\Vert A \Vert$: $$\overline{\Vert A \Vert}^{\mathrm{T}} = \Vert A \Vert$$
В ортонормированном базисе в E^n самосопряженный оператор имеет симметрическую матрицу	В ортонормированном базисе в U^n эрмитов оператор имеет эрмитову матрицу
Из собственных векторов самосопряженного оператора в E^n можно образовать ортонормированный базис	Из собственных векторов эрмитова оператора в U^n можно образовать ортонормированный базис

В таблицах 11.3.1a и 11.3.1b для сравнения приведены сопоставимые понятия и свойства для евклидова и унитарного пространств.

Эрмитовы формы. Среднее значение и дисперсия эрмитова оператора

Как и в любом линейном пространстве, в унитарном пространстве можно ввести билинейные и квадратичные формы (функционалы). Например, в унитарном пространстве непрерывных комплекснозначных функций $\varphi(\tau)$ вещественного аргумента квадратичным функционалом является интеграл

$$\Phi\big(\varphi(\tau)\big) = \iint\limits_{\Omega} \overline{\varphi(\omega)} K(\omega,\tau)\varphi(\tau)\, d\omega d\tau\,, \qquad \Omega \subseteq E^2.$$

Определение 11.4.1	Квадратичный функционал $\Phi(x) = \Big\langle x\big|\hat{R}x\Big\rangle$, где $x \in U$, а линейный оператор $\hat{R}$ — эрмитов, называется *эрмитовым функционалом* (или *эрмитовой формой*) в унитарном пространстве U.

Определение 11.4.2	Число $\underset{-a}{\hat{R}} = \Big\langle a\big|\hat{R}a\Big\rangle$ называется *средним значением эрмитова оператора* $\hat{R}$ *по* a — нормированному элементу из унитарного пространства U.

Замечания 11.4.1

1°. Если a — нормированный (то есть для которого верно $|a| = \sqrt{\langle a|a\rangle} = 1$) собственный вектор эрмитова оператора $\hat{R}$ с соответствующим собственным значением λ, то $\underset{-a}{\hat{R}} = \lambda$, поскольку в этом случае

$$\underset{-a}{\hat{R}} = \left\langle a|\hat{R}a\right\rangle = \langle a|\lambda a\rangle = \lambda\,\langle a|a\rangle = \lambda\,.$$

2°. Среднее значение эрмитова оператора вещественно. По определению эрмитовости имеем $\hat{A}^{+} = \hat{A}$, тогда

$$\underset{-a}{\hat{R}} = \left\langle a|\hat{R}a\right\rangle = \left\langle a|\hat{R}^{+}a\right\rangle = \left\langle \hat{R}a|a\right\rangle = \overline{\left\langle a|\hat{R}a\right\rangle}\,.$$

Но если некоторое число равно своему комплексному сопряжению, то оно вещественно.

3°. Если оператор умножения на константу κ определить как $\hat{\kappa} = \kappa\hat{E}$, где $\hat{E}$ — единичный оператор, то будет верно равенство $\underline{\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}}_{\,a} = 0$. Действительно,

$$\underline{\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}}_{\,a} = \left\langle a\middle|\left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\,\hat{E}\right)a\right\rangle = \left\langle a|\hat{R}a\right\rangle - \left\langle a\middle|\,\underset{-a}{\hat{R}}\,a\right\rangle =$$

$$= \underset{-a}{\hat{R}} - \underset{-a}{\hat{R}}\,\langle a|a\rangle = \underset{-a}{\hat{R}} - \underset{-a}{\hat{R}} = 0\,.$$

Определение 11.4.3	Число $\underset{=a}{\hat{R}} = \underline{\left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)^2}_{\,a}$ называется *дисперсией* эрмитова оператора $\hat{R}$ по a — нормированному элементу унитарного пространства.

Важные свойства дисперсии описывают следующие теоремы.

Теорема 11.4.1 **Дисперсия эрмитова оператора $\hat{R}$, действующего в унитарном пространстве, есть** *вещественное неотрицательное число*, **для которого справедливо равенство** $\underset{=a}{\hat{R}} = \underline{\hat{R}^2}_{\,a} - \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2$ **.**

Доказательство.

Покажем вначале, что число $\underset{=a}{\hat{R}}$ вещественное и неотрицательное. Оператор $\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}$, очевидно, эрмитов, поскольку эрмитовыми являются операторы $\hat{R}$ (по условию теоремы) и $\underset{-a}{\hat{R}}$ (как оператор умножения на константу). Тогда

$$\underset{=a}{\hat{R}} = \left\langle a \,\middle|\, \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 a \right\rangle = \left\langle a \,\middle|\, \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)\left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right) a \right\rangle =$$

$$= \left\langle \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)^+ a \,\middle|\, \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right) a \right\rangle =$$

$$= \left\langle \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right) a \,\middle|\, \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right) a \right\rangle \geq 0\,.$$

Наконец, исходя из определения 11.4.2, получаем

$$\underset{=a}{\hat{R}} = \underline{\left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)^2}_{\,a} = \left\langle a \,\middle|\, \left(\hat{R} - \underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 a \right\rangle =$$

$$= \left\langle a \,\middle|\, \left(\hat{R}^2 - 2\hat{R}\underset{-a}{\hat{R}} + \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2\right) a \right\rangle =$$

$$= \left\langle a \,\middle|\, \hat{R}^2 a \right\rangle - 2\left\langle a \,\middle|\, \hat{R}a \right\rangle \underset{-a}{\hat{R}} + \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 \left\langle a \,\middle|\, a \right\rangle =$$

$$= \underline{\hat{R}^2}_{\,a} - 2\left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 + \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 = \underline{\hat{R}^2}_{\,a} - \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 .$$

Теорема доказана.

Теорема 11.4.2 **Для эрмитова оператора $\hat{R}$, действующего в унитарном пространстве, дисперсия, взятая по его нормированному собственному вектору, равняется нулю.**

Доказательство.

Пусть $\hat{R}a = \lambda a$, тогда

$$\underset{=a}{\hat{R}} = \underline{\hat{R}^2}_{\,a} - \left(\underset{-a}{\hat{R}}\right)^2 = \left\langle a \,\middle|\, \hat{R}^2 a \right\rangle - \left\langle a \,\middle|\, \hat{R}a \right\rangle^2 = \left\langle a \,\middle|\, \hat{R}\hat{R}a \right\rangle - \left\langle a \,\middle|\, \lambda a \right\rangle^2 =$$

$$= \left\langle a \,\middle|\, \hat{R}\lambda a \right\rangle - \lambda^2 \left\langle a \,\middle|\, a \right\rangle^2 = \lambda \left\langle a \,\middle|\, \lambda a \right\rangle - \lambda^2 \left\langle a \,\middle|\, a \right\rangle^2 = \lambda^2 - \lambda^2 = 0\,,$$

поскольку $\left\langle a \,\middle|\, a \right\rangle = 1\,.$

Теорема доказана.

Соотношение неопределенностей

Для эрмитовых операторов, действующих в унитарном пространстве, справедлива

Теорема 11.5.1 (соотношение неопределенностей) **Для двух эрмитовых операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$, заданных в унитарном пространстве, имеет место соотношение**

$$\underset{=a}{\hat{A}}\;\underset{=a}{\hat{B}} \geq \frac{1}{4}\left|\ \underline{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}_{\,a}\right|^2 .$$

Доказательство.

1°. Рассмотрим оператор $\hat{Q} = \big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big) + \tau\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)\, i\,,$ где τ — вещественный параметр. Для $\hat{Q}$ эрмитово сопряженным будет оператор $\hat{Q}^{+} = \big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big) - \tau\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)\, i\,,$ поскольку эрмитовыми являются следующие четыре оператора: $\hat{A},\ \underset{-a}{\hat{A}},\ \hat{B},\ \underset{-a}{\hat{B}}$.

Заметим также, что оператор $\hat{Q}^{+}\hat{Q}$ — эрмитов и что из пункта 4° определения 11.1.1 следует

$$\left\langle a \,\middle|\, \hat{Q}^{+}\hat{Q}a \right\rangle = \left\langle \hat{Q}a \,\middle|\, \hat{Q}a \right\rangle \geq 0\,..$$

2°. Выражая $\hat{Q}^{+}\hat{Q}$ через операторы $\hat{A},\ \underset{-a}{\hat{A}},\ \hat{B},\ \underset{-a}{\hat{B}}$, получаем, что $\hat{Q}^{+}\hat{Q} =$

$$= \Big(\big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big) + \tau\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)\, i\Big)\Big(\big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big) + \tau\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)\Big)\, i =$$

$$= \big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big)^2 + \tau\big(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\big)i + \tau^2\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)^2.$$

3°. Обозначим $\hat{C} = -\big(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\big)i$ и подсчитаем среднее значение эрмитова оператора $\hat{Q}^{+}\hat{Q}$ на элементе a :

$$\underline{\hat{Q}^{+}\hat{Q}}_{\,a} = \underline{\big(\hat{A} - \underset{-a}{\hat{A}}\big)^2}_{\,a} + \tau\, \underline{\big(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\big)i}_{\,a} + \tau^2\, \underline{\big(\hat{B} - \underset{-a}{\hat{B}}\big)^2}_{\,a} =$$

$$= \underset{=a}{\hat{A}} - \tau\, \underset{-a}{\hat{C}} + \tau^2\, \underset{=a}{\hat{B}} \geq 0 \qquad \forall \tau\,.$$

Полученное значение $\underline{\hat{Q}^{+}\hat{Q}}_{\,a}$ есть вещественный квадратный трехчлен относительно τ, который должен быть неотрицательным при любом τ. Откуда следует, что его дискриминант не положителен: $\left(\underset{-a}{\hat{C}}\right)^2 - 4\underset{=a}{\hat{A}}\,\underset{=a}{\hat{B}} \leq 0$, или окончательно

$$\underset{=a}{\hat{A}}\,\underset{=a}{\hat{B}} \geq \frac{1}{4}\left|\,\underline{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}_{\,a}\right|^2 .$$

Теорема доказана.

Замечание 11.5.1. Теорема 11.5.1 верна как в конечномерном унитарном пространстве, так и в случае, когда унитарное пространство не имеет базиса.

Заметим также, что в курсах теоретической физики и квантовой механики неравенство указанное в формулировке этой теоремы имеет название *соотношение неопределенности Гайзенберга.*

Приведение в E^n квадратичных форм к диагональному виду

Задача отыскания базиса, в котором квадратичный функционал имеет диагональный или канонический вид, достаточно часто встречается в различных приложениях механики, физики, теории оптимального управления.

Приведение к диагональному виду квадратичной формы, заданной в ортонормированном базисе

Пусть в ортонормированном базисе $\{ e_1, e_2, \ldots, e_n \}$ евклидова пространства E^n задана некоторая квадратичная форма (квадратичный функционал) $\Phi(x)$. Рассмотрим задачу отыскания в E^n ортонормированного базиса $\{ e'_1, e'_2, \ldots, e'_n \}$, в котором координатное представление $\Phi(x)$ (то есть его матрица) имеет диагональный вид.

Принципиальная разрешимость подобной задачи для неортонормированного базиса следует из теоремы 9.2.1. Очевидно, что такой базис не единственный, и возникает вопрос о возможности построения в E^n ортонормированного базиса, в котором данный квадратичный функционал имеет диагональный вид.

Напомним предварительно (см. § 9.2), что квадратичный функционал в E^n может быть задан в координатной форме:

$$\Phi(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \varphi_{ij} \xi_i \xi_j = \|x\|_g^{\mathrm{T}} \|\Phi\|_g \|x\|_g \, ,$$

где столбец $\|x\|_g$ — координатное представление элемента $x = \sum\limits_{i=1}^{n} \xi_i g_i$ в базисе $\{ e_1, e_2, \ldots, e_n \}$, а $\|\Phi\|_g$ — матрица функционала $\Phi(x)$, описываемая определением 9.2.2.

Замена этого базиса при помощи матрицы перехода $\|S\|$ на базис $\{ e'_1, e'_2, \ldots, e'_n \}$ приводит к изменению матрицы квадратичного функционала по формуле $\|\Phi\|_{g'} = \|S\|^{\mathrm{T}} \|\Phi\|_g \|S\|$.

В Λ^n для построении базиса, в котором квадратичный функционал имеет диагональный вид, использовался (см. § 9.3) *метод выделения полных квадратов* (называемый иногда *методом Лагранжа*), применение которого может потребовать значительных затрат вычислительных ресурсов. В E^n для решения этой задачи более эффективным оказывается алгоритм основой которого является

Теорема 12.1.1 **Для всякого квадратичного функционала, заданного в ортонормированном базисе, существует ортонормированный базис, в котором этот функционал имеет диагональный вид.**

Доказательство.

1°. Матрица квадратичного функционала изменяется по правилу $\|\Phi\|_{e'} = \|S\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|_e\|S\|$, где $\|S\| = \|\sigma_{ij}\|$ — матрица перехода от базиса без штрихов к базису со штрихами, то есть $e'_j = \sum\limits_{i=1}^{n} \sigma_{ij} e_i \quad \forall j = [1, n]$.

2°. Поскольку матрица перехода от одного ортонормированного базиса к другому ортогональная (§ 10.4), то для нее справедливо равенство $\|S\|^{-1} = \|S\|^{\mathrm{T}}$. Откуда вытекает, что в данном случае $\|\Phi\|_{e'} = \|S\|^{-1}\|\Phi\|_e\|S\|$.

3°. Матрица $\|\Phi\|_e$ симметрическая, поэтому в ортонормированном базисе $\{ e_1, e_2, \ldots, e_n \}$ она определяет самосопряженный оператор $\hat{\Phi}$ (лемма 10.7.1), матрица которого в базисе $\{ e'_1, e'_2, \ldots, e'_n \}$ находится по формуле (теорема 8.3.2): $\|\Phi\|_{e'} = \|S\|^{-1}\|\Phi\|_e\|S\| = \|S\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|_e\|S\|$.

4°. Совпадение формул *изменения матриц* квадратичного функционала и самосопряженного оператора при переходе от одного *ортонормированного* базиса к другому позволяет решить нашу задачу, использовав в качестве базиса $\{ e'_1, e'_2, \ldots, e'_n \}$ ортонормированный базис из собственных векторов оператора $\hat{\Phi}$.

Этот базис существует (см. теорему 10.7.1) и в нем матрица оператора $\hat{\Phi}$ (а значит, и матрица квадратичного функционала $\Phi(x)$) имеет диагональный вид, причем на главной диагонали расположены собственные значения самосопряженного оператора $\hat{\Phi}$.

Теорема доказана.

Построение базиса, в котором два квадратичных функционала (один из которых знакоопределенный) имеют диагональный вид

Пусть в некотором базисе $\{ g_1, g_2, \ldots, g_n \}$ линейного пространства Λ^n задана пара квадратичных функционалов $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$, первый из которых знакоопределенный (например, положительно). Рассмотрим задачу отыскания базиса, в котором функционал $\Phi(x)$ имеет канонический, а функционал $\Psi(x)$ — диагональный вид.

Отметим, что условие знаковой определенности одного из приводимых квадратичных функционалов существенно, поскольку в общем случае два различных квадратичных функционала одним линейным преобразованием к диагональному виду не приводятся.

Действительно, известно (см. доказательство теоремы 4.4.1), что квадратичный функционал $\Phi(x) = A\xi_1^2 + 2B\xi_1\xi_2 + C\xi_2^2$ в Λ^2 можно привести к диагональному виду при помощи линейного оператора, сводящегося к повороту плоскости радиусов-векторов на угол α, который удовлетворяет уравнению $(A - C)\sin 2\alpha = 2B\cos 2\alpha$.

Однако для пары квадратичных функционалов $\Phi_1(x) = \xi_1^2 - \xi_2^2$ и $\Phi_2(x) = \xi_1\xi_2$ угла α, удовлетворяющего одновременно условиям $2\sin 2\alpha = 0$ и $0 = \cos 2\alpha$, очевидно, не существует.

Опишем теперь алгоритм приведения заданных в исходном базисе $\{ g_1, g_2, \ldots, g_n \}$ в Λ^n пары квадратичных функционалов $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$, первый из которых положительно определенный, соответственно к каноническому и диагональному виду.

1°. Поскольку квадратичный функционал $\Phi(x)$ положительно определенный, то для него в Λ^n найдется базис $\{ g'_1, g'_2, \ldots, g'_n \}$, в котором он имеет канонический вид, причем все его коэффициенты равны единице (см. теорему 9.2.1).

   Приведем этот функционал к каноническому виду каким-либо методом, например, выделив полные квадраты с нормировкой, если она потребуется. Одновременно *тем же самым методом* преобразуем и квадратичный функционал $\Psi(x)$.

2°. Введем в Λ^n скалярное произведение с единичной матрицей Грама, то есть по формуле $(x, y) = \sum\limits_{i=1}^{n} \xi'_i \eta'_i$, превратив тем самым данное линейное пространство Λ^n в евклидово E^n. Отметим, что в этом случае базис

$$\{ g'_1, g'_2, \ldots, g'_n \} = \{ e'_1, e'_2, \ldots, e'_n \},$$

   в котором $\Phi(x)$ имеет канонический вид, *ортонормированный.*

3°. Наконец, строим третий, также ортонормированный, базис $\{ e"_1, e"_2, \dots, e"_n \}$, приводя квадратичный функционал $\Psi(x)$ к *диагональному* виду по схеме, описанной в доказательстве теоремы 12.1.1. Пусть переход от второго к третьему базису выполняется при помощи *ортогональной* матрицы перехода $\|S\|$.

При этом переходе квадратичный функционал $\Phi(x)$ не потеряет канонического вида, поскольку из условия $\|\Phi\|_{e'}$ и ортогональности $\|S\|$ следует, что

$$\|\Phi\|_{e''} = \|S\|^{\mathrm{T}} \|\Phi\|_{e'} \|S\| = \|S\|^{-1} \|E\| \|S\| = \|S\|^{-1} \|S\| = \|E\| \,.$$

Таким образом, построен базис, в котором квадратичный функционал $\Phi(x)$ имеет канонический вид, а функционал $\Psi(x)$ — диагональный.

В заключение отметим, что матрица перехода от исходного базиса к искомому ортонормированному базису равна *произведению* матрицы перехода, при котором знакоопределенный квадратичный функционал приводится к каноническому виду, и ортогональной матрицы $\|S\|$.

Если в задаче одновременного приведения пары квадратичных функционалов, один из которых знакоопределенный соответственно к каноническому и диагональному виду, требуется найти лишь эти виды (а не формулы замены переменных), то можно воспользоваться более простой схемой расчетов.

Допустим, что положительно определенный квадратичный функционал $\Phi(x)$ приведен при помощи некоторой матрицы перехода $\|W\|$ к каноническому виду, то есть $\|W\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|\|W\| = \|E\|$. После того же преобразования матрица квадратичного функционала $\Psi(x)$ будет иметь вид $\|\Psi^*\| = \|W\|^{\mathrm{T}}\|\Psi\|\|W\|$.

Согласно теореме 12.1.1 в ортонормированном базисе для построения диагонального вида квадратичного функционала $\Psi(x)$ достаточно найти собственные числа самосопряженного оператора, матрица которого есть $\|\Psi^*\|$.

Найдем выражение для этой матрицы, учитывающее связь между матрицами $\|\Phi\|$ и $\|W\|$.

Из равенства $\|W\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|\|W\| = \|E\|$ очевидно получается, что $\|W\| = \left(\|W\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|\right)^{-1}$. Тогда, используя правила обращения и транспонирования произведения матриц, перестановочность обращения и транспонирования, а также симметричность и невырожденность матрицы $\|\Phi\|$, получаем

$$\|\Psi^*\| = \|W\|^{\mathrm{T}}\|\Psi\|\|W\| = \Big(\left(\|W\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\ \right)^{-1}\Big)^{\mathrm{T}}\|\Psi\|\|W\| =$$

$$= \Big(\left(\|W\|^{\mathrm{T}}\|\Phi\|\right)^{\mathrm{T}}\Big)^{-1}\|\Psi\|\|W\| = \Big(\|\Phi\|\|W\|\Big)^{-1}\|\Psi\|\|W\| =$$

$$= \|W\|^{-1}\Big(\|\Phi\|^{-1}\|\Psi\|\Big)\|W\|\,.$$

Это означает, что матрица $\|\Psi^*\|$ может рассматриваться как результат изменения матрицы линейного оператора $\Phi^{-1}\Psi$ при замене базиса с матрицей перехода $\|W\|$.

Поскольку собственные значения линейного оператора не зависят от выбора базиса, то решение задачи сводится к определению собственных значений оператора, имеющего матрицу $\|\Phi\|^{-1}\|\Psi\|$.

Собственные векторы и собственные значения этого оператора находятся согласно § 8.5 из системы линейных уравнений

$$\|\Phi\|^{-1}\|\Psi\|\|f\| = \lambda\|f\| \qquad \Longrightarrow \qquad \Big(\|\Psi\| - \lambda\|\Phi\|\Big)\|f\| = \|o\|\,.$$

Условие существования ненулевых $\|f\|$: $\det\Big(\|\Psi\| - \lambda\|\Phi\|\Big) = 0$ — алгебраическое уравнение относительно λ, корни которого и являются искомыми коэффициентами диагонального представления квадратичного функционала $\Psi(x)$.