

Se $g(x)$ for uma autofunção normalizada, $\varphi_i(x)$, a Equação (10.78) resulta em (aqui $w(x) = 1$)

$$a_i^* a_i \leq \int_a^b f^*(x) f(x) dx, \quad (10.81)$$

um resultado que também se origina da Equação (10.73).

Para representações úteis da função delta de Dirac em termos de conjuntos ortogonais de funções e da relação entre fechamento e completude, referimo-nos à relevante subseção da Seção 1.15, incluindo o Exercício 1.15.16 e, para representações em coordenadas *versus* momento em Mecânica Quântica, referimo-nos à Seção 15.6.

Resumo — Espaços Vetoriais, Completude

Aqui resumimos algumas propriedades de espaços vetoriais: em primeiro lugar, considerando os vetores como os já conhecidos vetores reais do Capítulo 1, e em seguida, como funções ordinárias. O conceito de **completude** foi desenvolvido para espaços vetoriais finitos (Capítulo 1, Equação (1.5)) e é transportado para espaços vetoriais infinitos. Por exemplo, em espaço euclidiano tridimensional todo vetor pode ser escrito em termos de uma combinação linear dos três vetores unitários coordenados (representando uma base) envolvendo as componentes cartesianas do vetor como os coeficientes de expansão. Ou uma função periódica de um espaço vetorial infinito pode ser expandida em termos do conjunto de funções periódicas $\sin nx, \cos nx, n = 0, 1, 2, \dots$, que forma uma base desse espaço. Uma vez que qualquer função periódica com propriedades razoáveis (explicadas detalhadamente no Capítulo 14) pode ser expandida em termos dessas funções de seno e co-seno, elas são completas e formam uma base de tal espaço de função linear.

1v. Descreveremos nosso espaço vetorial com um conjunto de n vetores linearmente independentes $\mathbf{e}_i$, $i = 1, 2, \dots, n$. Se $n = 3$, então $\mathbf{e}_1 = \hat{x}$, $\mathbf{e}_2 = \hat{y}$, e $\mathbf{e}_3 = \hat{z}$. Os $n\mathbf{e}_i$ **abrangem** o espaço vetorial linear.

1f. Descreveremos nosso espaço vetorial (funcional) com um conjunto de n funções linearmente independentes, $\varphi_i(x)$, $i = 0, 1, \dots, n-1$. O índice i começa com 0 para ficar de acordo com a notação clássica de polinômios. Aqui, admitimos que $\varphi_i(x)$ é um polinômio de grau i . Os $n\varphi_i(x)$ abrangem o espaço vetorial (funcional) linear.

2v. Os vetores em nosso espaço vetorial satisfazem as seguintes relações (Seção 1.2; as componentes do vetor são números):

- | | |
|---------------------------------------|---|
| (a) A adição de vetores é comutativa | $\mathbf{u} + \mathbf{v} = \mathbf{v} + \mathbf{u}$ |
| (b) A adição de vetores é associativa | $[\mathbf{u} + \mathbf{v}] + \mathbf{w} = \mathbf{u} + [\mathbf{v} + \mathbf{w}]$ |
| (c) Existe um vetor nulo | $\mathbf{0} + \mathbf{v} = \mathbf{v}$ |
| (d) Multiplicação por um escalar | |
| Distributiva | $a[\mathbf{u} + \mathbf{v}] = a\mathbf{u} + a\mathbf{v}$ |
| Distributiva | $(a + b)\mathbf{u} = a\mathbf{u} + (b)\mathbf{u}$ |
| Associativa | $a[b\mathbf{u}] = (ab)\mathbf{u}$ |
| (e) Multiplicação | |
| Por escalar unitário | $1\mathbf{u} = \mathbf{u}$ |
| Por zero | $0\mathbf{u} = \mathbf{0}$ |
| (f) Vetor negativo | $(-1)\mathbf{u} = -\mathbf{u}$ |

2f. As funções em nosso espaço funcional linear satisfazem as propriedades listadas para vetores (substituir “função” por “vetor”):

$$\begin{aligned}
 f(x) + g(x) &= g(x) + f(x) \\
 [f(x) + g(x)] + h(x) &= f(x) + [g(x) + h(x)] \\
 0 + f(x) &= f(x) \\
 a[f(x) + g(x)] &= af(x) + ag(x) \\
 (a + b)f(x) &= af(x) + bf(x) \\
 a[bf(x)] &= (ab)f(x) \\
 1 \cdot f(x) &= f(x) \\
 0 \cdot f(x) &= 0 \\
 (-1) \cdot f(x) &= -f(x).
 \end{aligned}$$

3v. Em espaço vetorial n dimensional, um vetor arbitrário $\mathbf{c}$ é descrito por suas n componentes $(c_1, c_2, \dots, c_n)$,

ou

$$\mathbf{c} = \sum_{i=1}^n c_i \mathbf{e}_i.$$

Quando $n\mathbf{e}_i$ (1) são linearmente independentes e (2) abrangem o espaço vetorial n dimensional, então os $\mathbf{e}_i$ formam uma base e constituem um conjunto **completo**.

3f. Em espaço funcional n dimensional um polinômio de grau $m \leq n - 1$ é descrito por

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n-1} c_i \varphi_i(x).$$

Quando as $n\varphi_i(x)$ (1) são linearmente independentes e (2) abrangem o espaço funcional n dimensional, então as $\varphi_i(x)$ formam uma base e constituem um conjunto **completo** (para descrever polinômios de grau $m \leq n - 1$).

4v. Um produto interno (escalar, produto interno) de um espaço vetorial é definido por

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{d} = \sum_{i=1}^n c_i d_i.$$

Se $\mathbf{c}$ e $\mathbf{d}$ tiverem componentes complexas em um sistema de coordenadas ortogonais, o produto interno é definido como $\sum_{i=1}^n c_i^* d_i$. O produto interno tem as propriedades de

- (a) Lei distributiva da adição $\mathbf{c} \cdot (\mathbf{d} + \mathbf{e}) = \mathbf{c} \cdot \mathbf{d} + \mathbf{c} \cdot \mathbf{e}$
- (b) Multiplicação escalar $\mathbf{c} \cdot a\mathbf{d} = a\mathbf{c} \cdot \mathbf{d}$
- (c) Conjugação complexa $\mathbf{c} \cdot \mathbf{d} = (\mathbf{d} \cdot \mathbf{c})^*$.

4f. Um produto interno de um espaço linear de funções é definido por

$$\langle f|g \rangle = \int_a^b f^*(x)g(x)w(x) dx.$$

A escolha da função de peso $w(x)$ e do intervalo (a, b) resulta da equação diferencial satisfeita por $\varphi_i(x)$ e das condições de fronteira, Seção 10.1. Em terminologia matricial, Seção 3.2, $|g\rangle$ é um vetor coluna e $\langle f|$ é um vetor linha, o adjunto de $|f\rangle$, onde ambos podem ter infinitamente muitas componentes. Por exemplo, se expandirmos $g(x) = \sum_i g_i \varphi_i(x)$, então $|g\rangle$ tem a i -ésima componente g_i em um vetor coluna e $\langle f|$ tem f_i^* como sua i -ésima componente em um vetor linha.

O produto interno tem as propriedades listadas para vetores:

- (a) $\langle f|g + h\rangle = \langle f|g\rangle + \langle f|h\rangle$
- (b) $\langle f|ag\rangle = a\langle f|g\rangle$
- (c) $\langle f|g\rangle = \langle g|f\rangle^*$.

5v. Ortogonalidade:

$$\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i = 0, \quad i \neq j.$$

Se os $n\mathbf{e}_i$ ainda não forem ortogonais, o processo de Gram-Schmidt pode ser usado para criar um conjunto ortogonal.

5f. Ortogonalidade:

$$\langle \varphi_i|\varphi_j \rangle = \int_a^b \varphi_i^*(x)\varphi_j(x)w(x) dx = 0, \quad i \neq j.$$

Se as $n\varphi_i(x)$ ainda não forem ortogonais, o processo de Gram-Schmidt (Seção 10.3) pode ser usado para criar um conjunto ortogonal.

6v: Definição de norma

$$|\mathbf{c}| = (\mathbf{c} \cdot \mathbf{c})^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n c_i^2 \right)^{1/2}.$$

Considera-se que os vetores de base $\mathbf{e}_i$ têm norma (comprimento) unitária $\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_i = 1$. As componentes de $\mathbf{c}$ são dadas por

$$c_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{c}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

6f. Definição de norma:

$$\|f\| = \langle f|f \rangle^{1/2} = \left[\int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx \right]^{1/2} = \left[\sum_{i=0}^{n-1} |c_i|^2 \right]^{1/2},$$

Identidade de Parseval. $\|f\| > 0$, a menos que $f(x)$ seja identicamente zero. Pode-se considerar que as funções de base $\varphi_i(x)$ têm norma unitária (normalização unitária),

$$\|\varphi_i\| = 1.$$

Os coeficientes de expansão de nosso polinômio $f(x)$ são dados por

$$c_i = \langle \varphi_i | f \rangle, \quad i = 0, 1, \dots, n-1.$$

7v. Desigualdade de Bessel:

$$\mathbf{c} \cdot \mathbf{c} \geq \sum_i c_i^2.$$

Se o sinal de igual for válido para todo $\mathbf{c}$, ele indica que as $\mathbf{e}_i$ abrangem o espaço vetorial, isto é, são completas.

7f. Desigualdade de Bessel:

$$\langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx \geq \sum_i |c_i|^2.$$

Se o sinal de igual for válido para toda f , permissível, ele indica que as $\varphi_i(x)$ abrangem o espaço funcional; isto é, elas são completas.

8v. Desigualdade de Schwarz:

$$|\mathbf{c} \cdot \mathbf{d}| \leq |\mathbf{c}| \cdot |\mathbf{d}|.$$

O sinal de igual é válido quando $\mathbf{c}$ for um múltiplo de $\mathbf{d}$. Se o ângulo incluído entre $\mathbf{c}$ e $\mathbf{d}$ é θ , então $|\cos \theta| \leq 1$.

8f. Desigualdade de Schwarz:

$$|\langle f|g \rangle| \leq \langle f|f \rangle^{1/2} \langle g|g \rangle^{1/2} = \|f\| \cdot \|g\|.$$

O sinal de igual é válido quando $f(x)$ e $g(x)$ são linearmente dependentes, isto é, quando $f(x)$ é uma múltipla de $g(x)$.

Agora, deixe $n \rightarrow \infty$, formando um espaço vetorial linear de número infinito de dimensões, l^2 .

9v. Em um espaço de número infinito de dimensões nosso vetor $\mathbf{c}$ é

$$\mathbf{c} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \mathbf{e}_i.$$

Exigimos que

$$\sum_{i=1}^{\infty} c_i^2 < \infty.$$

As componentes de $\mathbf{c}$ são dadas por

$$c_i = \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{c}, \quad i = 1, 2, \dots, \infty,$$

exatamente como em um espaço vetorial de número infinito de dimensões.

Então, deixe $n \rightarrow \infty$, formando um espaço vetorial (funcional) linear de número infinito de dimensões, L^2 . Então L representa Lebesgue, o índice 2 para a norma quadrática, isto é, o 2 em $|f(x)|^2$. Nossas funções não precisam mais ser polinômios, mas exigimos que $f(x)$ seja no mínimo contínua por partes (condições de Dirichlet para série de Fourier) e que $\langle f|f \rangle = \int_a^b |f(x)|^2 w(x) dx$ exista. Essa última condição costuma ser enunciada como um requisito de que $f(x)$ seja integrável de quadrado.

9f. Seqüência de Cauchy (expansão de Fourier generalizada): expanda $f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i \varphi_i(x)$ e deixe

$$f_n(x) = \sum_{i=0}^n f_i \varphi_i(x).$$

Se

$$\|f(x) - f_n(x)\| \rightarrow 0 \quad n \rightarrow \infty$$

ou

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int \left| f(x) - \sum_{i=0}^n f_i \varphi_i(x) \right|^2 w(x) dx = 0,$$

então temos convergência da média o que é análogo ao critério sequência da soma parcial de Cauchy para a convergência de uma série infinita, Seção 5.1.

Se toda sequência de Cauchy de vetores permissíveis (funções contínuas por partes de quadrado, integrável ao quadrado) convergir para um vetor limite em nosso espaço linear, diz-se que o espaço é completo. Então,

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i \varphi_i(x) \quad (\text{em quase todo lugar})$$

no sentido da convergência da média. Como observamos antes, essa é uma exigência mais fraca do que convergência ponto por ponto (valor fixo de x) ou convergência uniforme.

Coeficientes de Expansão

Os coeficientes de expansão de uma função f são definidos como

$$c_i = \langle \varphi_i | f \rangle, \quad i = 0, 1, \dots, \infty,$$

exatamente como em um espaço vetorial de número finito de dimensões. Por conseguinte,

$$f(x) = \sum_i \langle \varphi_i | f \rangle \varphi_i(x).$$

Um espaço linear (de número finito ou infinito de dimensões) que (1) tenha um produto interno definido ($\langle f | g \rangle$) e (2) seja completo é um **espaço de Hilbert**.

Espaço de Hilbert de número infinito de dimensões fornece uma estrutura natural de trabalho matemático para a moderna Mecânica Quântica. Fora da Mecânica Quântica, o espaço de Hilbert conserva sua força e beleza matemática abstrata e tem muitas utilizações.

Exercícios

10.4.1 Uma função $f(x)$ é expandida em uma série de autofunções ortonormais

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x).$$

Mostre que a expansão de série é única para um dado conjunto de $\varphi_n(x)$. Aqui, as funções $\varphi_n(x)$ estão sendo consideradas vetores **de base** em um espaço de Hilbert de número infinito de dimensões.

10.4.2 Uma função $f(x)$ é representada por um conjunto finito de funções de base $\varphi_i(x)$,

$$f(x) = \sum_{i=1}^N c_i \varphi_i(x).$$

Mostre que as componentes c_i são únicas, que não existe nenhum conjunto diferente c'_i .

Nota: Suas funções de base são automaticamente linearmente independentes. Elas não são necessariamente ortogonais.

10.4.3 Uma função $f(x)$ é aproximada por uma série de potências $\sum_{i=0}^{n-1} c_i x^i$ no intervalo $[0, 1]$. Mostre que minimizar o erro médio quadrático leva a um conjunto de equações lineares

$$A c = b,$$

em que

$$A_{ij} = \int_0^1 x^{i+j} dx = \frac{1}{i+j+1}, \quad i, j = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

e

$$b_i = \int_0^1 x^i f(x) dx, \quad i = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Nota: Os A_{ij} são os elementos da matriz de Hilbert de ordem n . O determinante dessa matriz de Hilbert é uma função rapidamente decrescente de n . Para $n = 5$, $\det A = 3,7 \times 10^{-12}$ e o conjunto de equações $Ac = \mathbf{b}$ está se tornando mal condicionado e instável.

10.4.4 No lugar da expansão de uma função $F(x)$ dada por

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \varphi_n(x),$$

com

$$a_n = \int_a^b F(x) \varphi_n(x) w(x) dx,$$

considere a aproximação de série **finita**

$$F(x) \approx \sum_{n=0}^m c_n \varphi_n(x).$$

Mostre que o erro médio quadrático

$$\int_a^b \left[F(x) - \sum_{n=0}^m c_n \varphi_n(x) \right]^2 w(x) dx$$

é minimizado considerando $c_n = a_n$.

Nota: Os valores dos coeficientes são independentes do número de termos na série finita. Essa independência é uma consequência da ortogonalidade e não valeria para um ajuste por mínimos quadrados usando potências de x .

10.4.5 Pelo Exemplo 10.2.2,

$$f(x) = \begin{cases} \frac{h}{2}, & 0 < x < \pi \\ -\frac{h}{2}, & -\pi < x < 0 \end{cases} = \frac{2h}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin(2n+1)x}{2n+1}.$$

(a) Mostre que

$$\int_{-\pi}^{\pi} [f(x)]^2 dx = \frac{\pi}{2} h^2 = \frac{4h^2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-2}.$$

Para um limite superior finito, essa expressão seria a desigualdade de Bessel. Para o limite superior ∞ , ela é a identidade de Parseval.

(b) Verifique que

$$\frac{\pi}{2} h^2 = \frac{4h^2}{\pi} \sum_{n=0}^{\infty} (2n+1)^{-2}$$

avaliando a série.

Sugestão: A série pode ser expressa como a função zeta de Riemann.

10.4.6 Diferencie a Equação (10.79),

$$\langle \psi | \psi \rangle = \langle f | f \rangle + \lambda \langle f | g \rangle + \lambda^* \langle g | f \rangle + \lambda \lambda^* \langle g | g \rangle,$$

com relação a λ^* e mostre que você obtém a desigualdade de Schwarz, Equação (10.78).