Сергей Гаврилов

Знакомство с линейной теорией

Тему функционального анализа продолжаем знакомством с обширным и важным его разделом – теорией векторных пространств и линейных операторов. Значимость обусловлена весомой причиной: большинство фундаментальных физических законов линейные. Есть и еще причина, не менее веская: теория предлагает красивые решения. А ведь, кто что ни говори, начинать искать лучше под фонарем.

Материал поначалу покажется хорошо знакомым, и отчасти повторяющим то, что уже было. Не смущайтесь, такое ощущение быстро пройдет! Впрочем, и мы подросли, посему распрощаемся с игрой в вопросы-ответы.

1. ВЕКТОРЫ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ... **3**

Векторное пространство ... *3*
Векторное пространство и векторное поле ... *4*
Линейная независимость ... *5*
Норма и банаховы пространства ... *6*
Скалярное произведение ... *7*
Арифметическое пространство ... *8*
Вектор в виде матрицы ... *9*
«Представление» вектора. Базис ... *9*
Ортонормированный базис ... *10*
Равенство Парсеваля ... *11*
Переход к другому базису ... *12*
Унитарный поворот ... *13*
Ортогональное дополнение и прямая сумма ... *13*

2. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ... **15**

Что такое оператор ... *15*
Векторы и ковекторы ... *16*
Преобразование операторов ... *16*
Действия с операторами ... *17*
Единичный оператор ... *18*
Прямой и обратный операторы ... *18*
Существование обратного оператора ... *19*
Унитарный оператор ... *20*
Унитарная эволюция ... *22*
Закон сохранения информации ... *23*
Линейные функционалы ... *24*
Сопряженный оператор ... *25*
Интересное об унитарном операторе ... *26*
Эрмитов оператор ... *26*
Матрицы Паули ... *27*
Бра- и кет-векторы ... *28*
Проектор ... *29*
Представление проектора ... *30*

3. ПОНЯТИЕ О СПЕКТРАХ ... **32**

Ядро оператора ... *32*
Собственные значения ... *33*
Собственные векторы ... *34*
Для чего это нужно ... *35*
Природа линейного оператора ... *36*
Спектральное представление оператора ... *37*
Почему комплексные числа ... *38*

4. РАБОТАЕМ СО СПЕКТРАМИ ... **39**

Спектры некоторых операторов ... *39*

Спектр унитарного оператора ... 39
Исследуем унитарный оператор ... 41
Спектр эрмитова оператора ... 42
Кое-что о коммутаторе ... 43
Обратно к обратным операторам ... 45
Спектры в работе ... 46

5. ВЕКТОРЫ В ГИЛЬБЕРТОВЫХ ПРОСТРАНСТВАХ ... **47**

Простейшее гильбертово пространство ... 47
Базис Шаудера и базис Гамеля ... 47
Полнота гильбертова пространства ... 48
Ряд Фурье ... 49
Функциональные пространства ... 49
Гильбертово пространство функций ... 50
Функциональный ряд Фурье ... 51
Дельта-функция ... 51
Равенство почти всюду ... 52
Проблема рядов Фурье ... 52
Частотное представление ... 53

6. ИНТЕГРАЛЬНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ... **55**

Континуальное представление ... 55
Слабая сходимость ... 55
Временное представление ... 57
Частотное представление ... 58
Необходимое оправдание ... 59
Слабая полнота ... 60
Обратное преобразование Фурье ... 61
Унитарные операторы ... 62
Сводка полезных формул ... 62

7. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ В БЕСКОНЕЧНОМЕРНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ ... **63**

Краткое содержание предыдущих серий ... 63
Прямой и обратный ... 63
Разбираемся со спектрами ... 65
Ассортимент функциональных пространств ... 66
Оператор как интегральное преобразование ... 67
Обобщенные функции ... 69
Производные обобщенных функций ... 71
Ядро обратного оператора ... 73
Ядро эрмитового оператора ... 74
Ядро унитарного оператора ... 76
Представления оператора ... 77

1. Векторы и представления

Кажется, что векторы знакомы даже по школе. Направленный геометрический отрезок – чего проще? Здесь мы преподнесем совершенно другой взгляд на векторы, значительно более широкий.

Векторное пространство

Линейное (векторное) пространство X – множество, на котором заданы *операции*, а именно, для $x, y \in X$: *сумма* элементов $x + y$ и *произведение* λx (λ – число).

В зарубежной математической литературе предпочитают термин *векторное пространство*, считая «линейное» синонимом одномерного.

А элементы векторного пространства можно именовать *векторами*. Но не стоит воображать что-то похожее на отрезок со стрелочкой… Векторы – то, что можно складывать между собой и умножать на число (как иногда говорят: на скаляр), и не более того. Векторами будут у нас, к примеру, функции: ведь и для них существует сложение и умножение на число.

Линейное пространство *замкнуто относительно указанных операций*: из $x, y \in X$ следует: $\lambda_1 x + \lambda_2 y \in X$. Любой элемент $\lambda_1 x + \lambda_2 y$ обязательно принадлежит пространству, если ему принадлежат x и y.

По указанной причине произвольное подмножество пространства не обязано само являться пространством. Например, числовая ось – линейное пространство. А отрезок $[0, 1]$ – нет: ведь при $x = 0{,}7$ и $y = 0{,}8$ точка $x + y$ «не существует». Но когда подмножество само по себе является линейным пространством (относительно тех же самых операций), говорят о *линейном подпространстве*, или *линейном многообразии*. Трехмерное пространство $\mathbb{R}^3$ – линейное пространство; плоскость $\mathbb{R}^2$ в нем, проходящая через начало координат – линейное подпространство.

Является ли некоторое множество линейным пространством или подпространством? Для ответа убеждаемся, что линейная комбинация элементов множества всегда является его же элементом.

Итак, в пространстве заданы операции. Как именно заданы – дело произвола, однако должны удовлетворять стандартным требованиям.

1. Для сложения:

а) коммутативность: $x + y = y + x$;

б) ассоциативность: $(x + y) + z = x + (y + z)$;

в) существование нулевого элемента: $x + 0 = x$;

г) существование противоположного элемента – такого, что: $x + (-x) = 0$.

2. Для умножения на число:

а) ассоциативность: $\lambda(\mu x) = (\lambda\mu)x$;

б) существование единицы: $1 \cdot x = x$;

в) $(\lambda + \mu)x = \lambda x + \mu x$;

г) $\lambda(x + y) = \lambda x + \lambda y$.

Здесь λ является действительным или комплексным числом. Соответственно говорят о векторном пространстве *над полем действительных чисел*, или *над полем комплексных*.

Задача 1. Пространство всех непрерывных функций $x(t)$ на отрезке $[a, b]$ действительной прямой – линейное? Предполагается сложение функций и умножение функции на число обычным способом: поточечно.

Для ответа надо установить, замкнуто ли пространство относительно операций. Да, замкнуто! Ведь функции $x_1(t)+x_2(t)$ и $\lambda x(t)$ тоже будут непрерывными.

Задача 2. Тот же вопрос, но теперь насчет пространства произвольных (необязательно непрерывных) функций на том же отрезке.

Кажется, все аналогично… Но это не так. Сложим, например, две функции: $\frac{1}{t}$ и $-\frac{1}{t}$ на отрезке $[0, 1]$. Члены с противоположными знаками сократились, сумма просто тождественный ноль, в том числе и $x(0)=0$. Однако ноль не вытекает из исходных функций, ведь каждая при $t=0$ не определена! Ответ отрицательный.

Векторное пространство и векторное поле

Не надо смешивать *векторное пространство* и *векторное поле*. Физическая практика может, пожалуй, дать повод к путанице. Рассматривают векторные поля в геометрическом пространстве (в привычном трехмерном, или в 4-мерном пространстве Минковского). То есть, каждой точке пространства присвоен вектор. А сами эти векторы – элементы векторного пространства, но какого?

Геометрические векторы $\mathbf{r}(x_1, x_2, x_3)$, разумеется, являются элементами того же геометрического пространства. А вот с физическими иначе. Школьник, воспринимая как должное вектор скорости в виде стрелки в трехмерии, не задумывается: вектор скорости $\mathbf{v}(v_1, v_2, v_3)$ является элементом другого пространства – пространства скоростей! И его орты (поскольку они существуют) не обязаны как-то соотноситься с геометрическими осями.

Векторное поле это функция, отображение геометрического n-мерного пространства $\mathbb{R}^{\mathrm{n}}$ на другое векторное пространство. Сопоставляющая каждому геометрическому вектору $\mathbf{r}$ некоторое значение, например, физического вектора.

Правда, в физике эти условные пространства чаще всего также имеют структуру $\mathbb{R}^{\mathrm{n}}$, они как бы наложены на геометрическое, так что в последнем можно указать направление любого вектора – будь то ускорения, или электрического поля. А иначе физические формулы были бы необоснованно запутанными.

Тем не менее, в общем случае физические поля могут выражаться векторами, которые никак не соответствуют геометрическим координатам. То есть, векторами, являющимися элементами абстрактного векторного пространства (и даже необязательно евклидового), не имеющего геометрического смысла. Это пространство, в частности, может быть и комплексным!

Впрочем, чего удивляться: мы и с тензорными полями на «ты».

Задача 1. Рассмотрим пространство последовательностей вида $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$. Сложение и умножение на число – почленное. Возьмем из него подмножество последовательностей, обладающих свойством: $x_1+x_3+x_5=0$. Вопрос: оно является линейным подпространством?

При умножении на любое число ноль останется нулем. Сумма нулей тоже ноль, так что и со сложением все в порядке. Ответ: да, является.

Но подмножество последовательностей, к примеру, таких что $x_1+x_3+x_5=1$, уже не образует линейного подпространства.

Задача 2. Задайте линейное пространство на множестве матриц одинакового размера.

Линейная независимость

Набор векторов *линейно независим*, если ни один из векторов набора не может быть выражен через остальные как их линейная комбинация.

В ходу и другое, эквивалентное определение: набор векторов линейно независим, если никакой их *нетривиальной* линейной комбинацией не может быть получен нулевой вектор. Нетривиальная – значит, не все коэффициенты равны нулю.

Количество линейно независимых векторов (максимально возможное) называют *размерностью* пространства.

Задача 1. Рассмотрим знакомое по задаче пространство последовательностей вида $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$. Какова его размерность?

Отберем из исходного пространства такие шесть векторов:

$e_1 = (1, 0, 0, 0, 0, 0)$,

$e_2 = (0, 1, 0, 0, 0, 0)$,

$e_3 = (0, 0, 1, 0, 0, 0)$,

$e_4 = (0, 0, 0, 1, 0, 0)$,

$e_5 = (0, 0, 0, 0, 1, 0)$,

$e_6 = (0, 0, 0, 0, 0, 1)$.

Они удобны следующим:

1) их линейная независимость очевидна – ни один не может быть представлен суммой других с некоторыми коэффициентами;

2) явственно видно, что какой угодно вектор $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6)$ может быть составлен линейной комбинацией $e_1 \dots e_6$. А значит, других кандидатов для включения в набор линейно независимых не найдется.

Размерность пространства равна 6.

Для решения задачи построена полная система линейно независимых векторов. Систему называют *полной*, если любой вектор пространства может быть образован линейной комбинацией векторов системы.

Задача 2. Какова размерность подпространства (также знакомого) последовательностей, обладающих свойством: $x_1 + x_3 + x_5 = 0$?

Принадлежат ли наши векторы $e_1 \dots e_6$ подпространству? Похоже, что нет: ведь первый, третий и пятый не обладают свойством $x_1 + x_3 + x_5 = 0$.

Придется заменить их подправленными вариантами. Например, так:

$(1, 0, -1, 0, 0, 0)$;

$(0, 1, 0, 0, 0, 0)$;

$(0, 0, 1, 0, -1, 0)$;

$(0, 0, 0, 1, 0, 0)$;

$(-1, 0, 0, 0, 1, 0)$;

$(0, 0, 0, 0, 0, 1)$.

Ну а теперь сложим первый вектор с третьим, получится: $(1, 0, 0, 0, -1, 0)$. И сравним с пятым: тот же самый, просто с противоположным знаком!

Таким образом, три вектора (1-й, 3-й и 5-й) оказались линейно зависимыми. Один из них (любой) лишний. Заметьте, введение связывающего уравнения всегда понижает размерность на единицу. Правильный ответ о размерности: она равна 5.

Задача 3. Рассмотрим линейное пространство комплексных матриц 2×2:

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix},$$

где x_k – комплексные числа. Операции примем естественные: сумма – результат почленного сложения, умножение на число λ – умножение каждой ячейки. Требуется определить размерность пространства.

Ответ будет зависеть от того, над каким полем рассматривается пространство. То есть, λ действительно или комплексно.

Пространство над полем действительных чисел восьмимерно. В самом деле, четыре матрицы:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

– очевидно, линейно независимы (ни одна не может быть выражена линейной комбинацией прочих). Суммируя их с подходящими действительными коэффициентами, можно получить любую матрицу:

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = a\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + b\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} + c\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c & 0 \end{bmatrix} + d\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Но только матрицу с действительными ячейками! Их недостаточно, чтобы создать матрицу с комплексными элементами. Потребуются еще четыре матрицы:

$$\begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & i \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ i & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix}.$$

А вот пространство над полем комплексных чисел четырехмерно. Умножая первые четыре матрицы на произвольные комплексные числа $a...d$, получаем любую комплексную матрицу.

Правильный ответ: пространство заданных матриц имеет *действительную размерность*, равную 8, и *комплексную*, равную 4.

Норма и банаховы пространства

Пространство может быть предметом анализа, когда в нем (тем или иным способом) введена *топология*, то есть, определена близость элементов. В линейном (векторном) пространстве топологии изначально нет: оно не обязано быть, например, метрическим. Хотя это было бы крайне удобно.

Впрочем, удобной является отнюдь не любая метрика! Метрику лучше всего вводить при помощи нормы. Линейное пространство, в котором задана норма, называется *нормированным*. Норма превращает линейное (векторное) пространство в метрическое; говорят о метрике, *порожденной* или *индуцированной* нормой.

Такая метрика хороша тем, что согласована с операциями – в отношении их непрерывности. Пусть $x + y = z$. Говоря упрощенно, если теперь x или y изменить на малую величину (в смысле принятой метрики), то и z изменится мало. То же самое для умножения. Это и значит непрерывность. Что, разумеется, можно выразить строго, в обычном стиле определения непрерывности.

Норма вектора – некоторый *функционал*, заданный на линейном пространстве (действительное число, определенное для любого элемента x). Обозначается $\|x\|$. Он обязан удовлетворять условиям:

1) $\|x\| \ge 0$, причем $\|x\| = 0$ только при $x = 0$;

2) $\|x + y\| \le \|x\| + \|y\|$;

3) $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$.

Между прочим, из последнего вытекает, что $\|-x\| = \|x\|$ – достаточно взять $\lambda = -1$.

Нередко удобнее оперировать квадратом нормы $\|x\|^2$, который еще называют *скалярным квадратом*.

Не во всяком линейном пространстве удается ввести норму! И даже если каким-то образом введена метрика, может не выполняться условие однородности нормы (третье). Поэтому норма первичное понятие. Введена норма – тем самым введена и метрика, как *норма разности*: $\rho(x, y) = \|x - y\|$.

Пространство нормировано – означает, что его метрика также линейна. Умножим все векторы на λ, ровно в λ раз изменятся и расстояния.

Нормированное функциональное пространство отчасти напоминает геометрическое. Линейное нормированное пространство, если оно *полно*, называют *банаховым*. Впрочем, к вопросу полноты еще вернемся.

Скалярное произведение

Понятие скалярного произведения знакомо, но мы подойдем теперь к нему с самой общей стороны. *Скалярное произведение* векторов x и y это число, обладающее следующими свойствами:

1) $\langle x, x \rangle$ неотрицательно (равно нулю только когда $x = 0$);

2) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$;

3) $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle$;

4) $\langle \lambda x, y \rangle = \langle x, \lambda y \rangle = \lambda \langle x, y \rangle$.

Если задано скалярное произведение, автоматически появляется и норма – *индуцированная* данным скалярным произведением:

$$\|x\|^2 = \langle x, x \rangle, \ \|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}.$$

Можно убедиться, что все требования к норме соблюдены.

Линейное пространство, в котором введено скалярное произведение, называется *евклидовым*. Чаще всего именно такие нас и будут интересовать!

В евклидовом пространстве вводится и метрика (как всегда, норма разности):

$$\rho(x, y) = \|x - y\| = \sqrt{\langle x - y, x - y \rangle}.$$

Тогда, наоборот, норма вектора – его расстояние от *нулевого вектора*.

Нормированное, и тем более евклидово пространство знаменуют переход на новый уровень. Так, геометрические векторы мы могли суммировать чисто геометрически – по правилу параллелограмма, для чего не требуется никаких мерок и масштабов. А вот для получения скалярного произведения (числа) никак не обойтись без «образмеривания» векторов.

Если $\langle x, y \rangle = 0$, векторы *x* и *y* называют *ортогональными*. Набор попарно ортогональных векторов составляет линейно независимую систему.

Задача. Доказать последнее утверждение.

Предположим обратное: взаимно ортогональные x, y, z линейно зависимы: $z = \lambda_1 x + \lambda_2 y$. Составим скалярное произведение $\langle z, x \rangle$.

По 4-му свойству скалярного произведения:

$$\langle z, x \rangle = \langle \lambda_1 x + \lambda_2 y, x \rangle = \langle \lambda_1 x, x \rangle + \langle \lambda_2 y, x \rangle .$$

Второе слагаемое равно нулю из-за ортогональности *x* и *y*. А вот первое не нулевое, оно равно $\lambda_1 \|x\|^2$. Получается, при принятом допущении *z* и *x* не могли бы быть ортогональными.

Арифметическое пространство

Рассмотрим множество конечных последовательностей: $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$, где x_k – действительные числа. Операции зададим следующим образом.

Сложение: $x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, ..., x_n + y_n)$.

Умножение на число: $\lambda x = (\lambda x_1, \lambda x_2, ..., \lambda x_n)$.

Ясно, что нулевой вектор должен иметь вид: $(0, 0, ..., 0)$.

Если имеем два вектора: $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$ и $y = (y_1, y_2, ..., y_n)$, то их скалярным произведением будем считать число:

$$\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + ... + x_n y_n . \qquad (1.1)$$

Например, скалярным произведением векторов $x = (4, -2, 8, 3)$ и $y = (1, -\frac{1}{2}, -2, 0)$ будет:

$$\langle x, y \rangle = 4 \cdot 1 + (-2) \cdot (-\frac{1}{2}) + 8 \cdot (-2) + 3 \cdot 0 = -11 .$$

Можно проверить, что все свойства векторных операций и скалярного произведения выполняются. Получили *n*-мерное евклидово пространство над полем действительных чисел, имеющее обозначение $\mathbb{R}^n$ – так называемое *арифметическое пространство*. Его элементы называют *арифметическими векторами*.

Арифметическое пространство может быть и комплексным: *n*-мерное евклидово пространство над полем комплексных чисел $\mathbb{C}^n$. В последнем случае определение (1.1) скалярного произведения уже не годится. Если числа, составляющие *x*, комплексные, скалярное произведение превращается в комплексную величину; соответственно, комплексным может оказаться и $\langle x, x \rangle$! Такое недопустимо: $\langle x, x \rangle$ – квадрат длины вектора (нормы), а норма должна быть величиной действительной и неотрицательной (так называемое требование *эрмитовости* скалярного произведения).

Поэтому для общего случая принимают скалярное произведение в такой форме:

$$\langle x, y \rangle = x_1^* y_1 + x_2^* y_2 + ... + x_n^* y_n . \qquad (1.1a)$$

Звездочкой обозначается комплексное сопряжение.

В зарубежных текстах скалярное произведение комплексных векторов часто называют *внутренним произведением* (*inner product*).

Теперь квадрат нормы выразится так: $\|x\|^2 = \langle x, x \rangle = x_1^* x_1 + x_2^* x_2 + \ldots + x_n^* x_n$. Произведение числа на сопряженное – всегда действительно и неотрицательно.

В свете сказанного несколько меняются свойства скалярного произведения, сформулируем их набело:

1) $\langle x, x \rangle$ неотрицательно (равно нулю только когда $x = 0$);

2) $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle^*$;

3) $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle$;

4) $\langle x, \lambda y \rangle = \lambda \langle x, y \rangle$, но $\langle \lambda x, y \rangle = \lambda^* \langle x, y \rangle$.

Оказывается, сомножители скалярного произведения в принципе неравноправны – важный вывод. И даже считают, что, к примеру, в $\langle x, x \rangle$ правый и левый векторы взяты из разных пространств (*дуальных*), так, что соответствующие друг другу векторы комплексно сопряжены. Стоит запомнить!

Посему взятие комплексного сопряжения от скалярного произведения равносильно перестановке сомножителей.

Задача. Доказать, что $\langle x, y_1 + y_2 \rangle = \langle x, y_1 \rangle + \langle x, y_2 \rangle$.

Подсказка: поменяйте местами сомножители, перейдя к комплексному сопряжению, и используйте свойство 3.

Вектор в виде матрицы

Арифметический вектор можно записать как таблицу чисел – матрицу. Например, как вектор-столбец:

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{bmatrix}.$$

Матрицы двух векторов (вектор-строка и вектор-столбец) можно перемножить по обычному правилу умножения матриц, и получить скалярное произведение:

$$\begin{bmatrix} x_1^* & x_2^* & \ldots & x_n^* \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{bmatrix} = x_1^* y_1 + x_2^* y_2 + \ldots + x_n^* y_n. \qquad (1.2)$$

В матричной форме хорошо видно, что сомножители в скалярном произведении неравноправны – та самая дуальность.

«Представление» вектора. Базис

Вектор – нечто данное, он как бы существует объективно, *инвариантен*, что является центральным принципом векторного исчисления. Векторы могут быть объектами любой природы.

Но с произвольными объектами непонятно, как работать. Снова возьмем геометрические векторы: чтобы сложить два, надо к концу одного приставить начало другого, затем соединить начало первого с концом второго. Странная операция! Совсем непохожа на то, что мы понимаем под арифметическим суммированием. Скалярное произведение – тоже нечто малопонятное: произведение длин векторов на косинус угла.

То ли дело арифметические векторы: действия с ними просты и могут выполняться автоматически. Посему для работы с векторами – им сопоставляют соответствующие арифметические. В физике это принято называть *представлением*. Оно позволяет:

1) просто идентифицировать векторы;

2) свести операции над векторами к обычным арифметическим.

Дело в том, что все *n*-мерные евклидовы пространства *изоморфны*. Это значит, что между векторами разных пространств (но одинаковой размерности) можно установить соответствие, сохраняющее отношения. Конкретно, можно заменить данное линейное пространство арифметическим пространством $\mathbb{R}^n$ (или $\mathbb{C}^n$), а векторы – арифметическими векторами. Которые будут однозначно соответствовать исходным, да и векторные операции для них – простые арифметическое, хорошо знакомые. И получим правильный результат.

Итак, каждому вектору, чем бы он ни был, удобно сопоставить арифметический вектор; он будет, как говорят физики, *представителем* вектора. Совершенно одинаковые представления могут быть у векторов различной природы.

Чтобы получить представление, вводят в пространстве *базис*, то есть, набор векторов – такой, что любой вектор представляется линейной комбинацией базисных. Базисом может являться любая полная система линейно независимых векторов, с такими мы уже знакомы.

В конечномерном пространстве базис всегда существует, так как очевидна конструктивная процедура его построения. Выберем произвольный вектор: он будет первым в базисе (e_1). Построим на нем линейную оболочку – одномерное линейное подпространство (геометрическая аналогия: прямая). Можно выбрать следующий вектор: любой, не лежащий в данном подпространстве. Он линейно независим от первого; включаем его в базис как e_2. Строим оболочку уже на двух векторах (как бы плоскость). Можно выбрать третий вектор, не входящий в новое подпространство... И так до последнего, *n*-го.

Ортонормированный базис

Если пространство нормировано, можно указать векторы, «длина» (норма) которых равна единице: $\|e\|^2 = 1$. Если оно вдобавок евклидово, тогда среди единичных векторов можно выбрать *n* ортогональных: $e_1, e_2, \dots e_n$. Таких, что $\langle e_j, e_k \rangle = 0$, если только $j \neq k$.

Ортогональные векторы с единичной нормой называют *ортонормированными*.

Примечание: индекс *i* мы нигде не используем, чтобы не было путаницы с числом (мнимой единицей), обозначаемым той же буквой.

По-другому условие ортонормированности записывают так:

$\langle e_j, e_k \rangle = \delta_{jk}$, где δ_{jk} – *символ Кронекера*, что означает:

$\delta_{jk} = 0$ при $j \neq k$; $\delta_{jk} = 1$ при $j = k$.

Система $e_1, e_2, \dots e_n$ образует *ортонормированный базис* евклидового пространства. Проводя геометрическую аналогию, можно представлять себе *n* взаимно перпендикулярных осей координат, и e_k как единичный вектор *k*-й оси (или *орт*). Именно ортонормированный базис очень удобен, и дальше будет ясно – почему.

Поскольку имеем базис, и он полон, постольку любой вектор x пространства X можно представить в виде суммы:

$$x = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 + ... = \sum_k x_k e_k \ . \qquad (1.3)$$

Числа x_k называются *компонентами* вектора в принятом базисе (иначе называют *координатами*, или *коэффициентами разложения* по ортам). Из них можно составить последовательность – арифметический вектор $(x_1, x_2, ..., x_n)$, который и есть представитель исходного вектора x в принятом базисе. Наш вектор, чем бы он ни являлся, превратился в набор чисел – компонент. При анализе мы всегда имеем дело с «представителем» вектора, а не с ним самим!

Продолжая геометрическую аналогию, можно сказать, что каждое слагаемое в (1.3) – *проекция* x на соответствующую ось координат. Вектор равен сумме всех своих проекций.

В свою очередь, всевозможные суммы вида (1.3) с разными коэффициентами x_k в совокупности и образуют векторное пространство X. Говорят о пространстве, *натянутом* на орты e_k, или *растянутом* ортами.

В ортонормированном базисе k-й коэффициент разложения x_k равен просто скалярному произведению вектора на k-й орт. В самом деле, перемножим скалярно $x = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 + ...$ и e_k: получаем единственный ненулевой член $x_k e_k e_k^*$, равный x_k, что и требовалось.

Итак, в ортонормированном базисе для компонент вектора справедливо:

$$x_k = \langle e_k, x \rangle . \qquad (1.4)$$

Заметьте: x_k это k-я компонента вектора x, а e_k – k-й вектор базиса. Некоторое несоответствие, которое надо держать в голове.

Подставляя в сумму (1.3), получаем для вектора полезное равенство:

$$x = \sum_k \langle e_k, x \rangle e_k \ . \qquad (1.5)$$

Кстати, в (1.4) на место x можно поставить в частности любой из векторов самого базиса: $\langle e_k, e_j \rangle$. А поскольку это равно δ_{jk}, очевидно, что базисные векторы в *собственном представлении* (в своей системе базисных векторов) выглядят так:

$$e_1 = (1, 0, ... 0),$$

$$e_2 = (0, 1, ... 0),$$

…

$$e_n = (0, 0, ... 1).$$

Подобный набор уже у нас фигурировал!

Равенство Парсеваля

Скалярное произведение вектора на себя (квадрат нормы) $\langle x, x \rangle = \|x\|^2$ иначе называется *скалярным квадратом*. Вспомним, что:

$\langle x, x \rangle = x_1x_1^* + x_2x_2^* + ... + x_nx_n^* = \sum_k x_k x_k^*$. Это все равно что $\sum_k |x_k|^2$.

Используя (1.4), получаем так называемое *равенство Парсеваля*:

$$\|x\|^2=\sum_k |x_k|^2=\sum_k |\langle e_k, x\rangle|^2 .$$

Кажется, ничего интересного оно в себе не заключает. Просто теорема Пифагора в n-мерном пространстве: квадрат длины вектора равен сумме квадратов длин проекций на ортогональные оси. Но придет момент, когда равенство окажется полезным: проверить состоятельность базиса e_k, что не всегда удается иным способом. Ведь ортонормированная система векторов не обязана являться базисом (может быть не полной).

Переход к другому базису

Пусть $(x_1, x_2, ..., x_n)$ является «представителем» вектора x в базисе e; в другом базисе e' компоненты вектора будут другими.

Обозначим новый базис: $e'_1, e'_2, e'_3, \ldots$ – тогда новые компоненты x выразятся согласно (1.4) как:

$$x'_j=\langle e'_j, x\rangle . \qquad (1.6)$$

Вот и все. Потренируемся на четырехмерном векторе с компонентами $x(4,-2,8,3)$. Требуется перейти к следующему базису (да, он тоже ортонормированный!):

$$e'_1=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right);$$

$$e'_2=\left(\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right);$$

$$e'_3=\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right);$$

$$e'_4=\left(\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right).$$

Вычисляем новые компоненты по (1.6):

$$x'_1=\langle e'_1, x\rangle=\frac{1}{2}\cdot 4-\frac{1}{2}\cdot 2+\frac{1}{2}\cdot 8+\frac{1}{2}\cdot 3=\frac{13}{2},$$

$$x'_2=\langle e'_2, x\rangle=\frac{1}{2}\cdot 4-\frac{1}{2}\cdot 2-\frac{1}{2}\cdot 8-\frac{1}{2}\cdot 3=-\frac{9}{2},$$

$$x'_3=\langle e'_3, x\rangle=\frac{1}{2}\cdot 4+\frac{1}{2}\cdot 2-\frac{1}{2}\cdot 8+\frac{1}{2}\cdot 3=\frac{1}{2},$$

$$x'_4=\langle e'_4, x\rangle=\frac{1}{2}\cdot 4+\frac{1}{2}\cdot 2+\frac{1}{2}\cdot 8-\frac{1}{2}\cdot 3=\frac{11}{2}.$$

Итого, получили $\left(\frac{13}{2},-\frac{9}{2},\frac{1}{2},\frac{11}{2}\right)$ – в новом базисе вид разложения по ортам изменился, хотя сам вектор тот же самый.

Вычислим квадрат нормы вектора в исходном представлении $(4,-2,8,3)$:

$$\|x\|^2=4^2+(-2)^2+8^2+3^2=93.$$

Легко подсчитать, что и для представления в новом базисе также $\|x\|^2=93$. Говорят, что преобразование к другому базису *унитарно*: оно не изменяет длины векторов, и вообще скалярные произведения.

Унитарный поворот

Последний сюжет можно осветить детальнее. В (1.6) запишем x через компоненты исходного базиса:

$$x = \sum_k x_k e_k = x_1 e_1 + x_2 e_2 + x_3 e_3 + \ldots$$

Тогда получаем для j-й компоненты x':

$$x'_j = \left\langle e'_j \,,\, \sum_k x_k e_k \right\rangle .$$

Используя свойства скалярного произведения, можно преобразовать:

$$x'_j = \sum_k \left\langle e'_j \,,\, x_k e_k \right\rangle = \sum_k x_k \left\langle e'_j \,,\, e_k \right\rangle .$$

Обозначив: $U_{jk} = \left\langle e'_j \,,\, e_k \right\rangle$, получили:

$$x'_j = \sum_k U_{jk} x_k \qquad (1.7)$$

– что представляет собой произведение матрицы с вектором:

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & \ldots & U_{1n} \\ U_{21} & U_{22} & \ldots & U_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ U_{n1} & U_{n2} & \ldots & U_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \ldots \\ x'_n \end{bmatrix} .$$

Что-то в этом духе и ожидалось! Новый ортонормированный базис есть повернутый прежний. Перейти к повернутому базису – все равно что сохранить базис, а повернуть сам вектор, и U_{jk} это матрица поворота. Формула (1.7) в краткой записи:

$$x' = Ux .$$

Заметьте, что компоненты преобразованного вектора всегда зависят от другого индекса: нумеруются другие оси, даже если они совпадают с прежними.

Для примера, решенного выше, можно вычислить элементы матрицы через $U_{jk} = \left\langle e'_j \,,\, e_k \right\rangle$, получив:

$$\begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ U_{21} & U_{22} & U_{23} & U_{24} \\ U_{31} & U_{32} & U_{33} & U_{34} \\ U_{41} & U_{42} & U_{43} & U_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} .$$

Структура матрицы поворота (унитарной) попросту повторяет новый базис. Так что ее строки и столбцы взаимно ортогональны.

Ортогональное дополнение и прямая сумма

Пусть в евклидовом пространстве X задан базис, так, что для любого вектора:

$$x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + x_3 e_3 + \ldots = \sum_k x_k e_k \,. \qquad (1.8)$$

Разобьем слагаемые на две группы:

$$x = \sum_k x_k e_k + \sum_j x_j e_j . \qquad (1.8а)$$

Разумеется, нумерация здесь уже иная, чем в (1.8), так как разбиение совершенно произвольно.

Очевидно следующее.

1. Каждая из сумм в (1.8а) являет собой линейное подпространство, «натянутое» на группу ортов. Обозначим подпространства A и $A^{\perp}$.

2. Любые два вектора, взятые из разных подпространств, взаимно ортогональны, поскольку состоят из взаимно ортогональных слагаемых.

3. Подпространства A и $A^{\perp}$ в совокупности не образуют *X*: $A \bigcup A^{\perp} \neq X$. Контрпример: вектор $x' = ae_k + be_j$, когда e_k и e_j из разных подпространств. Ясно, что $x' \notin A$ и $x' \notin A^{\perp}$, тем не менее, $x' \in X$.

И в то же время любой вектор $x \in X$ можно представить в виде суммы: $x = x' + x''$, где $x' \in A$, $x'' \in A^{\perp}$. Ситуацию описывают в таких терминах:

1) подпространство $A^{\perp}$ является *ортогональным дополнением* подпространства *A* до пространства *X*;

2) пространство *X* является *прямой суммой* подпространств A и $A^{\perp}$: $X = A \oplus A^{\perp}$.

Очевидная иллюстрация: в трехмерном пространстве ось X_3 является ортогональным дополнением плоскости $X_1 X_2$ до всего пространства. Любой трехмерный вектор (x_1, x_2, x_3) можно разложить на сумму вектора из плоскости $(x_1, x_2, 0)$ и вектора оси X_3 $(0, 0, x_3)$. И вообще, евклидово пространство является прямой суммой подпространств – осей базиса.

2. Линейные операторы

К теме линейных операторов мы подошли в конце первого раздела вплотную. Здесь рассмотрим операторы в конечномерных пространствах – предмет линейной алгебры. Сюжет долженствует расставить вехи, чтобы перейти позже к более интересным вопросам – операторам в бесконечномерных пространствах.

Что такое оператор

Вообще *оператор* – в принципе, то же самое, что функция: $y = f(x)$ – в «школьной» записи. Способ, правило, по которому элементу x ставится в соответствие элемент y. Имеются в виду элементы некоторых множеств. Оператор как бы преобразует «вход» в «выход».

Записывается: $y = \hat{A}x$, где $\hat{A}$ – символ оператора. Операторы, особенно в физике, часто отмечают «крышечкой» (*hat*), примем здесь это правило.

В линейных пространствах x и y – векторы: оператор преобразует вектор в вектор.

Не только пространство считаем линейным. Но и операторы тоже! Оператор $\hat{A}$ называют *линейным*, если:

1) $\hat{A}(x_1 + x_2) = \hat{A}x_1 + \hat{A}x_2$ (аддитивность);

2) $\hat{A}(\lambda x) = \lambda(\hat{A}x)$ (однородность).

Важно, что линейное преобразование всегда переводит нулевой вектор в нулевой – не сдвигает начало координат.

Операторное выражение $y = \hat{A}x$, кажется, правильнее записать: $y = \hat{A}(x)$, как принято для функций. Но придется привыкнуть к первой форме. Дело в том, что в конечномерных пространствах линейный оператор – именно сомножитель, только умножаются матрицы. Рассмотрим это детальнее.

Линейная операция, преобразующая $x(x_1, x_2, \dots x_n)$ в $y(y_1, y_2, \dots y_n)$, имеет стандартный общий вид линейных уравнений:

$$y_1 = A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \dots + A_{1n}x_n = \sum_k A_{1k}x_k \,,$$

$$y_2 = A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \dots + A_{2n}x_n = \sum_k A_{2k}x_k \,, \qquad (2.1)$$

$$\dots$$

$$y_n = A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \dots + A_{nn}x_n = \sum_k A_{nk}x_k \,.$$

Как говорилось, имеем здесь перемножение матриц:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}. \qquad (2.1a)$$

Правило умножения матриц считаем известным: матрица произведения строится таким образом, что каждый ее элемент равен сумме произведений элементов: в соответствующей строке первого множителя и столбце второго. В точности как в (2.1).

Итак, в n-мерном пространстве линейный оператор в самом деле произведение (пускай – матричное). Но даже когда нет никаких матриц, удобно считать действие линейного оператора $\hat{A}x$ своеобразным «умножением» $\hat{A}\cdot x$ (хотя и не определенным строго): линейность $\hat{A}$ дает такое право.

Впрочем, было бы неверно идентифицировать оператор с матрицей. Она является *представителем* оператора! В другом координатном базисе матрица изменится, хотя оператор останется тем же самым. Оператор инвариантен.

Говоря уж до конца, роль оператора (правила преобразования) выполняет не сама матрица. А умножение матрицы на вектор. Но не будет беды, если считать оператором собственно матрицу.

Векторы и ковекторы

В (2.1а) оператор действует на вектор-столбец. А почему не на вектор-строку, тут есть какой-то глубокий смысл? Ответ: может не быть, но может и быть – в зависимости от задачи.

Во всяком случае, векторы возможно рассматривать в разных пространствах. В каком-то смысле они являются *сопряженными*, дуальными: *вектор* и *ковектор*.

Если на входе вектор-строка, то, по правилам умножения матриц, верный результат получится здесь уже другой операцией, в «сопряженной» форме:

$$\begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \ldots & x_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \ldots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \ldots & A_{n2} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ A_{1n} & A_{2n} & \ldots & A_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \ldots & y_n \end{bmatrix}. \qquad (2.2)$$

Чтобы получить нужное произведение, пришлось матрицу оператора переместить на второе место. И к тому же транспонировать (строки заменить столбцами, и наоборот).

В символическом виде имеем: $y = xA^T$.

Осталось добавить: где вектор-столбец и где вектор-строка – определяет контекст задачи. А быть может, все это вообще чепуха. Ведь представление операторов в виде матриц необязательно.

Тем не менее, необходимость учитывать вопросы *дуальности* возникает нередко. Например, для скалярного произведения: вспомним, что в записи $\langle x, x \rangle$ – x справа и x слева являются разными векторами, и даже из разных пространств. Представление одного из них отличается от представления другого комплексным сопряжением.

Преобразование операторов

Мы умеем преобразовывать векторы к другому координатному базису. В другом базисе изменится также и матрица оператора. Как именно?

Пусть имеем в матричной форме:

$$y = Ax. \qquad (2.3)$$

В новых координатах:

$$y' = A'x'. \qquad (2.3а)$$

Переход к другому представлению вектора происходит через унитарную матрицу преобразования координат U:

$$x' = Ux,\ y' = Uy.$$

Тогда (2.3а) перепишем:

$Uy = A'Ux$.

А теперь умножим почленно на матрицу U^{-1}, обратную U :

$U^{-1}Uy = U^{-1}A'Ux$.

Обратной матрицей называют такую, которая «нейтрализует» прямую (что как раз имеем слева). В итоге получается:

$y = U^{-1}A'Ux$.

Сравнивая с (2.3), обнаруживаем, что:

$A = U^{-1}A'U$. Или, в другую сторону: $A' = UAU^{-1}$. (2.4)

Заметим, что нельзя в правой части переставить местами, например, *U* и *A*, чтобы произвести «сокращение»: матричное произведение некоммутативно. Но если все-таки *A* такова, что $UA = AU$, тогда получим $A' = A$, матрица оператора будет *инвариантной*. И такие матрицы существуют!

Обратная матрица мелькнула раньше срока, и будет разъяснена впоследствии.

Действия с операторами

Не только для элементов линейного пространства можно ввести операции – сложение и умножение на число. Но и для операторов тоже!

Пусть $y = \hat{A}x$. Понятно, что $\lambda y = \hat{A}(\lambda x)$ (следствие линейности). Запишем это как $\lambda y = \hat{A}'x$. Будем считать, что $\hat{A}'$ – произведение оператора $\hat{A}$ на λ: $\hat{A}' = \lambda\hat{A}$. Имеем определение произведения оператора на число.

Пусть $y = \hat{A}_1x + \hat{A}_2x$. Будем считать, что $y = \hat{A}'x$, где $\hat{A}'$ – сумма: $\hat{A}' = \hat{A}_1 + \hat{A}_2$. Вот определение суммы операторов.

Таким образом, линейные операторы также образуют линейное пространство.

Вводят даже умножение операторов! Так, $y = \hat{B}\hat{A}x$ означает, что на *x* подействовал оператор $\hat{A}$, а затем на результат – оператор $\hat{B}$ (разбор идет справа налево). Два оператора можно заменить одним – результирующим: $y = \hat{C}x$. Считаем, что $\hat{C} = \hat{B}\hat{A}$ это оператор, представляющий собой произведение операторов.

Внимание: в общем случае произведение не перестановочно. Как говорят, операторы *не коммутируют*, $\hat{A}\hat{B}x \neq \hat{B}\hat{A}x$. Впрочем, ясно, что для $y = \hat{A}\hat{A}x = \hat{A}^2x$ такой проблемы нет. Потому свободно рассматривают операторные многочлены типа $a_n\hat{A}^n + a_{n-1}\hat{A}^{n-1} + \ldots + a_1\hat{A} + a_0$, с которыми можно обращаться, как с обычными. И даже операторные уравнения типа $a_n\hat{A}^n + a_{n-1}\hat{A}^{n-1} + \ldots + a_1\hat{A} + a_0 = 0$. И даже операторные ряды, например, ряд Тейлора.

Задача. Раскрыть скобки: $(\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B})$.

Выполняем действия:

$(\hat{A} + \hat{B})(\hat{A} - \hat{B}) = (\hat{A} + \hat{B})\hat{A} - (\hat{A} + \hat{B})\hat{B} = \hat{A}^2 + \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} - \hat{B}^2$.

Разумеется, не идет речи о том, чтобы сократить $\hat{A}\hat{B}$ и $\hat{B}\hat{A}$, так что привычное по школьной алгебре $\hat{A}^2 - \hat{B}^2$ не получается.

Кстати, «довесок» вида $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$ возникает при работе с операторами там и сям; он называется *коммутатором*:

$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют, то $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = 0$.

Далее мы познакомимся с некоторыми «знаменитыми» операторами.

Единичный оператор

Единичный оператор I не изменяет любой вектор: $y = Ix = x$. Здесь важно слово «любой».

Иногда вместо I пишут попросту 1. Но надо помнить, что тут оператор, а не число! Ему соответствует *единичная матрица*, мы говорили также о символе Кронекера δ_{jk}:

$$I = \delta_{jk} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix}. \qquad (2.5)$$

В самом деле, $y = x$ означает:

$y_1 = x_1$,

$y_2 = x_2$,

и так далее. Вот это и записано матрицей (2.5).

Единичный оператор, хотя и прост, обладает многими важными свойствами. Например, единичная матрица не меняется при переходе к другим координатам, она *инвариантна*. Потому что данный оператор коммутирует с любым: $I\hat{A} = \hat{A}I = \hat{A}$. Да и вообще: если оператор I переводит любой вектор в тот же самый, то причем здесь система координат.

Матрица δ_{jk}, хотя оставляет вектор вроде бы прежним, но (как и любой оператор) формально изменяет индексацию. В тензорном виде мы записали бы:

$\delta_{jk}x^j = x_k$ – свертка по индексу j.

Возможен оператор *умножения на число*: $y = \lambda Ix$ для любого x. Естественно, его матрица тоже диагональна, но вместо единиц фигурируют множители λ (так называемая *скалярная матрица*). Оператор также инвариантен. Больше того: скалярные матрицы образуют линейное подпространство, проверьте!

В частности, *нулевой оператор* ($\lambda = 0$) превращает любой вектор в нулевой: $0x = 0$. Матрица, разумеется, состоит из одних нулей.

Прямой и обратный операторы

Выше мы отчасти коснулись данного предмета. Пусть $y = \hat{A}x$, тогда: $x = \hat{A}^{-1}y$. Здесь $\hat{A}^{-1}$ – оператор, *обратный* $\hat{A}$. Он тоже является линейным.

Простой подстановкой получаем: $y = \hat{A}\hat{A}^{-1}y$, а также: $x = \hat{A}^{-1}\hat{A}x$. Значит, $\hat{A}^{-1}\hat{A}$ эквивалентен единичному оператору: $\hat{A}^{-1}\hat{A} = \hat{A}\hat{A}^{-1} = I$.

Всякому понятно, что $\hat{A}^{-1}$ просто условное обозначение, а не «минус первая степень».

Получить матрицу, обратную данной – непростая задача. Хотя существуют отдельные виды операторов, для которых обратный получить несложно. А вот с определителем обратной матрицы все просто: это число, обратное определителю прямой: $\left|A^{-1}\right| = |A|^{-1} = \frac{1}{|A|}$.

Ведь при матричном умножении определители перемножаются, а $A^{-1}A = I$ не должно изменять определитель. Надеюсь, что понятие *определителя (детерминанта)* знакомо.

Задача 1. Доказать, что оператор, обратный линейному, также линеен.

Запишем условия линейности для $\hat{A}^{-1}$. Первое:

$\hat{A}^{-1}x + \hat{A}^{-1}y = \hat{A}^{-1}(x+y)$.

Применим оператор $\hat{A}$ (заведомо линейный) к левой и правой части равенства:

$\hat{A}\hat{A}^{-1}x + \hat{A}\hat{A}^{-1}y = \hat{A}\hat{A}^{-1}(x+y)$, которое (после замены $\hat{A}\hat{A}^{-1} = I$) превращается в тождество.

Проверить второе условие еще легче.

Задача 2. Проверить, справедливо ли равенство:

$\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A} = I$.

Из осторожности введем обозначение:

$\hat{B}^{-1}\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A} = \hat{C}$.

Умножаем на $\hat{B}$ слева:

$\hat{A}^{-1}\hat{B}\hat{A} = \hat{B}\hat{C}$.

Умножаем на $\hat{A}$ слева:

$\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}\hat{C}$.

Вот и ответ: $\hat{C} = I$ только если $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$, то есть, когда $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют.

Задача 3. Дан оператор в пространстве $\mathbb{C}^2$:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}.$$

Проверить, что обратный оператор имеет вид:

$\hat{A}^{-1} = \frac{1}{D}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$, где D – определитель матрицы.

Просто перемножаем матрицы прямого и обратного оператора:

$$\hat{A}\hat{A}^{-1} = \frac{1}{D}\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} = \frac{1}{ad-bc}\begin{bmatrix} ad-bc & -ab+ab \\ cd-cd & -bc+ad \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I.$$

Все верно.

Существование обратного оператора

Кажется, просто: если $y = \hat{A}x$, то $x = \hat{A}^{-1}y$. Но есть проблема, ведь некоторым y может соответствовать – либо много разных x, либо ни одного x. В обоих случаях $x = \hat{A}^{-1}y$ теряет смысл.

Посему, кстати, $\hat{A}^{-1}\hat{A}$ и $\hat{A}\hat{A}^{-1}$ – не вполне одно и то же. Правда, мы сказали, что все это единичный оператор… но только в том случае, если и $\hat{A}$ и $\hat{A}^{-1}$ существуют!

Если существуют разные *x*, которым соответствует одинаковый *y*, говорят, что прямой оператор *не инъективен*.

Если существуют *y*, которым не соответствует ни одного *x*, говорят, что прямой оператор *не сюръективен*.

И в том, и в другом случае обратный оператор, очевидно, не существует.

Задача. Найти оператор, обратный выражаемому матрицей:

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -15 & 3 \end{bmatrix}.$$

Несложно заметить, что матрица *вырождена*: вторая строка это первая, умноженная на -3. А второй столбец это первый, поделенный на -5. Определитель равен: $|A| = 5 \cdot 3 - (-1)(-15) = 0$ – как и полагается для вырожденной матрицы.

Распишем:

$$y_1 = 5x_1 - x_2;$$

$$y_2 = -15x_1 + 3x_2.$$

Как известно, такая система относительно x_1, x_2 не решается.

В самом деле, первое уравнение задает y_1 из x. Но, согласно второму, y_2 определяется тогда однозначно: $y_2 = -3y_1$. Типичная ситуация несюръективности: произвольный вектор *y*, у которого $y_2 \neq -3y_1$, не будет иметь соответствующего ему x. Далее мы увидим, что оператор еще и не инъективен.

Ответ: обратный оператор не существует. Что понятно и сразу, ведь не существует определителя обратной матрицы (деление на ноль).

Итак, не все линейные операторы одинаковы! Среди них есть особые: не имеющие обратного. И такие особые операторы могут являться линейной комбинацией вполне обычных. Вывод чрезвычайной важности, в чем предстоит убедиться.

Унитарный оператор

Мы уже знаем, что переход от одного базиса к другому происходит через некоторый оператор:

$$y = \hat{U}x.$$

Очевидно, поворот (неважно – вектора или системы ортов) не изменяет длину вектора. Следовательно, оператор $\hat{U}$ особенный: не влияет на длины векторов, и вообще на скалярные произведения:

$$\left\langle \hat{U}x, \hat{U}y \right\rangle = \left\langle x, y \right\rangle. \qquad (2.6)$$

Оператор, обладающий свойством (2.6), называется *унитарным*, и U (*unitary*) – его общепринятое обозначение. Термины: «унитарное преобразование», «унитарный поворот» – будут встречаться нередко.

В частности, и единичный оператор является унитарным! Он соответствует «вырожденному» повороту, оставляющему вектор неизменным.

Из определения следует, что произведение унитарных операторов дает унитарный. И обратный унитарному – унитарный; все это подсказывает, что унитарные преобразования образуют *группу*. Информация, которую полезно отложить в долговременную память.

Вот матрица, поворачивающая вектор в плоскости (двумерном евклидовом пространстве $\mathbb{R}^2$) на угол α:

$$\begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}. \qquad (2.7)$$

Если унитарная матрица имеет действительные элементы, как (2.7), ее называют *ортогональной*: строки и столбцы даже ортонормированы. Для любой пары строк (столбцов), если их рассматривать как векторы, справедливо:

$$A_{j1}A_{k1} + A_{j2}A_{k2} + ... + A_{jn}A_{kn} = \delta_{jk} .$$

Проверим скалярные произведения для (2.7), взяв первую и вторую строки:

$$A_{11}A_{21} + A_{12}A_{22} = \cos\alpha\cdot\sin\alpha - \sin\alpha\cdot\cos\alpha = 0 .$$

Первую с первой:

$$A_{11}A_{11} + A_{12}A_{12} = \cos^2\alpha + \sin^2\alpha = 1 .$$

Еще одно свойство: определитель унитарной матрицы равен по модулю единице. Доказательство воспоследует, а пока проверим для нашей матрицы:

$$A_{11}A_{22} - A_{21}A_{12} = \cos^2\alpha + \sin^2\alpha = 1 .$$

В качестве интересного примера рассмотрим простейшую *матрицу Адамара*:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

Нетрудно убедиться, что она ортогональна. Правда, не ортонормирована, скалярный квадрат равен 2. Но это неважно, при нужде можно ввести нормирующий множитель. А заменяя каждую ячейку матрицы такой же матрицей по принципу *фрактала*, можно строить следующие матрицы Адамара. Вот вторая:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Ну и так далее. Строки матриц Адамара, если их развернуть во времени – это *функции Уолша*, образующие полную систему ортогональных функций. Они играют важную роль в технике многоканальной связи.

Задача 1. Доказать, что оператор умножения на комплексное число $e^{i\varphi}$ является унитарным. Фаза φ – действительное число.

Убедимся, что он не изменяет длину вектора:

$\sum e^{i\varphi}x_k e^{-i\varphi}x_k^* = \sum x_k x_k^* = \|x\|^2$ (поскольку $e^{i\varphi}e^{-i\varphi} = 1$). Что и требовалось доказать.

Данный оператор эквивалентен скалярной матрице:

$$\begin{bmatrix} e^{i\varphi} & 0 & ... & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} & ... & 0 \\ ... & ... & ... & ... \\ 0 & 0 & ... & e^{i\varphi} \end{bmatrix}.$$

Определитель равен по модулю единице. Например, для матрицы 2×2 легко получаем определитель $e^{i\varphi}\cdot e^{i\varphi} = e^{2i\varphi}$.

Задача 2. Является ли унитарным оператор, отображаемый диагональной матрицей, состоящей из чисел $+1$ и -1?

Унитарная эволюция

Рассмотрим еще одну задачу: несложную, но практически важную.

Состояние некоторой физической системы представляется вектором Ψ в пространстве состояний. Определить эволюцию $\Psi(t)$ во времени.

Кажется, к задаче невозможно подступиться: недостает данных. Но мы все же попытаемся. Систему считаем линейной, так что ее состояние в последующий момент времени линейно связано с предшествующим состоянием:

$\Psi(t_2) = \hat{U}\Psi(t_1)$, где $t_2 > t_1$.

Если $t_2 = t_1$, тогда, естественно, $\hat{U} = I$. Так что оператор $\hat{U}$ не константа, а функция времени.

Примем еще два допущения. Во-первых, исходно независимые (ортогональные) состояния должны и впредь оставаться независимыми. Это означает, что оператор $\hat{U}$ сохраняет скалярные произведения, он унитарный. Мы его и обозначили соответственно!

Далее, функция $\Psi(t)$ у нас дифференцируемая. В физических приложениях так и бывает. Следовательно, можно записать:

$$\Psi(t+dt) = \Psi(t) + d\Psi(t). \qquad (2.8)$$

С другой стороны:

$\hat{U}(t+dt) = \hat{U}(t) + d\hat{U}(t) = I + d\hat{U}(t)$, а значит:

$$\Psi(t+dt) = (I + d\hat{U})\Psi(t). \qquad (2.9)$$

Объединяем (2.8) и (2.9):

$$\Psi(t) + d\Psi(t) = (I + d\hat{U})\Psi(t). \qquad (2.10)$$

Сокращаем равные $\Psi(t)$ и $I\Psi(t)$, тогда от уравнения (2.10) остается: $d\Psi(t) = d\hat{U}\Psi(t)$. Поделив на dt, получим:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \frac{d\hat{U}}{dt}\Psi.$$

Производная оператора $\frac{d\hat{U}}{dt}$ является тоже оператором (но уже необязательно унитарным), обозначим его до поры $\hat{A}$, получая окончательно дифференциальное уравнение *унитарной эволюции* системы:

$$\frac{d\Psi}{dt} = \hat{A}\Psi. \qquad (2.11)$$

Задача сводится к решению уравнения (2.11), причем всю ее недостающую конкретику вобрал в себя оператор $\hat{A}$.

Понятно, что $\frac{d}{dt}$ слева – тоже оператор. Но (2.11) это уравнение, а не тождество! Справедливое не для всех Ψ, а только для тех, которые и будут решениями. Так что нельзя «сократить» Ψ и получить:

$\frac{d}{dt} = \hat{A}$ – неверно!

В квантовой механике (где Ψ является *волновой функцией*) из $\hat{A}$ вытаскивают некоторый множитель, представляя (2.11) в виде:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\hat{H}\Psi\,. \qquad (2.12)$$

Для чего такое? Смотрите: в элементарном случае, когда $\Psi=e^{i(\omega t-\mathbf{kr})}$ (волна де Бройля), получается:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t}=\frac{\partial e^{i(\omega t-\mathbf{kr})}}{\partial t}=i\omega\Psi\,.$$

Подставив в (2.12), легко выведете $\hat{H}=\hbar\omega$ (энергия!) Коэффициент $-i\hbar$ придал $\hat{H}$ физический смысл. И в общем случае, когда оператор $\hat{H}$ не является простым множителем, он все же характеризует энергетическое состояние системы.

Частная производная в (2.12) появилась потому, что волновая функция это поле, она зависит от нескольких переменных: не только от времени, но и от координат также.

Уравнение (2.12) – известное *уравнение Шрёдингера* (так называемое «зависящее от времени», или нестационарное), к нему в будущем предстоит вернуться. Оператор $\hat{H}$ – *оператор Гамильтона* (или *гамильтониан*), имеющий физический смысл, поясненный выше.

Может показаться, что не все в наших выкладках гладко. Что еще за «производная оператора»? Разъясним.

Поскольку Ψ – вектор, наше $\frac{d\Psi}{dt}=\frac{d\hat{U}}{dt}\Psi$ на самом деле является системой уравнений:

$$\frac{d\Psi_1}{dt}=(\frac{dU_{11}}{dt}\Psi_1+\frac{U_{12}}{dt}\Psi_2+\ldots),$$

$$\frac{d\Psi_2}{dt}=(\frac{dU_{21}}{dt}\Psi_1+\frac{dU_{22}}{dt}\Psi_2+\ldots),$$

…

и так далее.

Производные берутся от компонент матрицы, что вполне законно.

Закон сохранения информации

Возможно, что рассуждение выше, касающееся ортогональных состояний, не слишком ясно. Можно махнуть рукой: вопрос-то больше физический, и пока в стороне от фарватера. Тем не менее, попробуем объясниться.

Физика, помимо известных законов и теорий, использует некоторые общие принципы. Настолько фундаментальные, что часто их не озвучивают специально. И потому, кстати, они не всегда осознаются. В качестве примера можно привести *принцип причинности*: если событие *B* является следствием *A*, то *A* опережает *B* по времени. Теоретическая физика опирается на важные принципы *однородности и изотропности пространства*, а также *однородности времени*.

Здесь мы затронем еще один базовый физический принцип – иногда его называют *законом сохранения информации*.

Пусть физическая система находилась в состоянии Ψ_1, и через известное время в результате эволюции перешла в состояние Φ_1: $\Psi_1\to\Phi_1$. Допустим, что та же (или идентичная) система, но находившаяся в другом состоянии $\Psi_2\neq\Psi_1$ также перешла в Φ_1: $\Psi_2\to\Phi_1$. На житейский взгляд ничего особенного… Но для фундаментальных физических систем такое недопустимо: Φ зависит от Ψ, следовательно, должно получиться другим, если изменилось Ψ. Все, что мы знаем о физических законах, говорит, что время обратимо – в том смысле, что, зная конечное состояние, можно установить, каково было исходное.

Говоря иначе, информация о разном начальном состоянии не может быть потеряна при эволюции систем во времени, она сохраняется:

$$\Psi_1 \to \Phi_1, \ \Psi_2 \to \Phi_2 .$$

Кстати, по этой причине – проблема так называемого *исчезновения информации в черных дырах* воспринимается физиками крайне серьезно.

А теперь пусть исходные состояния Ψ_1 и Ψ_2 описываются ортогональными векторами: $\left\langle \Psi_2^*, \Psi_1 \right\rangle = 0$. Допустим, через некоторое время в результате эволюции они перешли соответственно в Φ_1 и Φ_2, такие, что $\left\langle \Phi_2^*, \Phi_1 \right\rangle \neq 0$ – говоря условно, угол между векторами состояний теперь не 90°, а меньше. Что же получается: предоставив системе еще какое-то время, можно дождаться, когда угол станет нулевым, векторы совпадут?

Системы, стартовавшие из разных состояний, пришли к одинаковому. Закон сохранения информации отвергает такое предположение. А значит, конечные состояния Φ_1 и Φ_2 сохраняют ортогональность. Потому и говорят об *унитарной эволюции*, что означает: не изменяющей векторное произведение.

А теперь пора вернуться в основное русло.

Линейные функционалы

Частным случаем *линейного оператора* вроде бы является *линейный функционал*. Однако неожиданно предстоит узнать, что последний имеет совсем другую природу.

Вспомним: функционал это функция, принимающая численные значения. То есть, отображающая произвольное линейное пространство на пространство, например, вещественных чисел $\mathbb{R}$, или комплексных $\mathbb{C}$. Каждому элементу (вектору) x ставящая в соответствие число $y = f(x)$.

Чтобы не было путаницы с обозначениями и пониманием: f – функционал (собственно правило отображения, аналогично оператору), а $f(x)$ – его значение, число, результат действия функционала на вектор x. И, тоже аналогично, $f(x)$ можно понимать как произведение $f \cdot x$ – в каком-то смысле, а в каком, сейчас станет ясно.

Попробуем записать линейный функционал через матричное произведение. Но как это сделать, ведь теперь результат y не вектор, а обычное число (его называют *скаляр*)? Впрочем, скаляр ведь тоже матрица – размером 1×1. Просто матрица оператора f теперь будет не квадратной.

Это должно выглядеть так:

$$\begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \dots & f_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = [y] = y . \qquad (2.13)$$

Или в формульном виде:

$$y = f_1 x_1 + f_2 x_2 + \dots + f_n x_n . \qquad (2.13a)$$

Что-то знакомое? Неудивительно: (2.13) и (2.13а) – формулы скалярного произведения векторов f и x: $y = \langle f, x \rangle$. Значение функционала (число) равно скалярному произведению самого функционала и исходного вектора.

Получается, линейный функционал является вектором! Вот и обещанная неожиданность.

Условия линейности функционала те же, что и любого линейного оператора:

$f(x_1 + x_2) = f(x_1) + f(x_2)$;

$f(\lambda x) = \lambda f(x)$.

Заметим что конкретный функционал, заданный на векторном пространстве, это фиксированный вектор. Задать функционал означает задать вектор f, а значение функционала $y = f(x) = \langle f, x \rangle$ – скалярное произведение данного вектора с вектором x.

Раз уж вышло так, что f – вектор, то всевозможные линейные функционалы (всевозможные правила преобразования вектора в число) в совокупности образуют линейное пространство. Его называют *сопряженным* к X, и обозначают X^*. Пространство функционалов парно, двойственно исходному пространству. Снова: дуальность, вектор-ковектор… Чуть выше у нас функционал оказался вектором-строкой (в отличие от вектора-столбца x).

Если рассматриваются действительные векторы и действительные функционалы, то в $y = \langle f, x \rangle$ можно поменять местами сомножители: $y = \langle x, f \rangle$. Теперь у нас пространство векторов f (сопряженное, мы его обозначили X^*), на котором, в свою очередь, можно ввести всевозможные линейные функционалы. Они (так как тоже являются векторами) образуют *второе сопряженное пространство* $(X^*)^* = X^{**}$… которое, как мы видим, совпадает с X (левый сомножитель!). Говорят, что векторное пространство *рефлексивно*.

Рефлексивность $X^{**} = X$ – свойство конечномерных пространств. В бесконечномерных скалярное произведение может вообще не существовать. В *гильбертовых* пространствах скалярное произведение существует, и такие пространства рефлексивны.

Задача. Является ли норма вектора линейным функционалом?

Нет. Для линейного функционала $f(-x) = -f(x)$, а ведь норма не может быть отрицательной.

Сопряженный оператор

Вернемся к скалярному произведению двух векторов, и в очередной раз припомним, что «правый» и «левый» векторы в нем разные – дуальные. Следовательно, $\langle x, \lambda y \rangle = \langle \lambda x, y \rangle$ справедливо лишь при действительных λ, в общем же случае:

$$\langle x, \lambda y \rangle \neq \langle \lambda x, y \rangle.$$

Правильно будет записать: $\langle x, \lambda y \rangle = \langle \lambda^* x, y \rangle$.

Умножение на скаляр – частный случай линейного оператора. Поэтому тем более: $\langle x, \hat{A} y \rangle \neq \langle \hat{A} x, y \rangle$.

Правильно будет записать: $\langle x, \hat{A} y \rangle = \langle \hat{A}^+ x, y \rangle$, где $\hat{A}$ и $\hat{A}^+$ не одно и то же.

Оператор $\hat{A}^{+}$ называют *сопряженным* (или *эрмитово-сопряженным*) оператору $\hat{A}$: аналог комплексного сопряжения, но уже применительно к операторам. Нередко вместо простого крестика используют значок †, что вызывает похоронные ассоциации.

Матрицу сопряженного оператора получить несложно. В действительном случае она получается из матрицы исходного транспонированием: $A^{+} = A^{T}$ – данный вопрос мы уже затрагивали. В комплексном – надо дополнительно перейти к комплексно-сопряженным значениям: $A^{+} = (A^{T})^{*}$. Особенно задерживаться здесь не будем.

Повторное эрмитово сопряжение приводит к исходному оператору! Это видно из следующей цепочки:

$$\left\langle x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{A}^{+}x, y \right\rangle = \left\langle y, \hat{A}^{+}x \right\rangle^{*} = \left\langle (\hat{A}^{+})^{+} y, x \right\rangle^{*} = \left\langle x, (\hat{A}^{+})^{+} y \right\rangle,$$

откуда: $\hat{A} = (\hat{A}^{+})^{+}$. Вы, надеюсь, не забыли, что множители в скалярном произведении можно менять местами, переходя к комплексному сопряжению.

Интересное об унитарном операторе

В свете эрмитова сопряжения открываются новости относительно унитарного оператора. Во-первых, для него – сопряженный является обратным:

$$\hat{U}^{+} = \hat{U}^{-1} \qquad (2.14)$$

(что порой даже принимают за определение унитарного оператора). Это легко показать. Для унитарного оператора:

$$\left\langle \hat{U}x, \hat{U}y \right\rangle = \left\langle x, y \right\rangle,$$

но, с другой стороны,

$\left\langle \hat{U}x, \hat{U}y \right\rangle = \left\langle \hat{U}^{+}\hat{U}x, y \right\rangle$. Комментарии излишни.

Итак, альтернативное определение унитарного оператора:

$$\hat{U}^{+}\hat{U} = I. \qquad (2.14а)$$

Следовательно, без труда можно получить матрицу, обратную унитарной: всего-навсего меняем местами строки и столбцы, плюс берем комплексное сопряжение, если матрица комплексная. Вот и вторая новость!

Имеется третья, которую оформим в виде задачи.

Задача. Доказать, что определитель матрицы унитарного оператора равен по модулю единице.

Опираемся на определение (2.14а). Что происходит с определителем при эрмитовом сопряжении? Транспонирование матрицы не меняет определитель; комплексное сопряжение всех элементов ведет, возможно, к комплексному сопряжению всего определителя, но не меняет его модуля.

Из (2.14а) следует, что произведение определителей равно единице, а из равенства их модулей вытекает, что модуль каждого равен 1.

В частности, унитарные матрицы, определитель которых равен точно 1, называются *специальными*.

Эрмитов оператор

Помимо общих случаев, существуют частные, и могут найтись линейные операторы, для которых все же $\left\langle x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{A}x, y \right\rangle$. Их называют *эрмитовыми*.

Поскольку в принципе $\left\langle x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{A}^{+}x, y \right\rangle$, следовательно, для эрмитового оператора $\hat{A}^{+} = \hat{A}$ – он совпадает со своим сопряженным! Отсюда второе название операторов: *самосопряженные* (хотя, говоря строго, это не вполне одно и то же). Эрмитовы операторы являются «операторными аналогами» действительных чисел: последние тоже ведь совпадают со своими комплексно-сопряженными. Разумеется, под действительными (как говорится, «здесь и далее»), ради краткости, понимаются комплексные числа, мнимая часть которых нулевая.

Из равенства $A^{+} = (A^{T})^{*} = A$ проистекают очевидные выводы о свойствах матрицы эрмитова оператора:

1) элементы, симметричные относительно главной диагонали, комплексно сопряжены (или просто равны, если действительны);

2) сама главная диагональ действительна.

Из $A = (A^{T})^{*}$ следует $A^{*} = A^{T}$: комплексное сопряжение возвращает матрицу, преобразованную транспонированием, к исходному виду.

Эрмитовы операторы обладают примечательными свойствами, о которых еще предстоит узнать. Пока отметим, что сумма эрмитовых операторов и их произведение на действительное число тоже эрмитовы (доказательство не приводится – до того оно просто). Вывод: эрмитовы операторы образуют векторное пространство над полем вещественных чисел!

Интересно, что единичный оператор, а также оператор умножения на вещественную константу – эрмитовы. Почему? Вопросы настолько легкие, что также оставляются читателю.

Задача. Найти вещественную размерность пространства эрмитовых матриц 2×2.

Из свойств матрицы эрмитова оператора следует, что ее структура обязана быть такой:

$$\begin{bmatrix} a & c+id \\ c-id & b \end{bmatrix},$$

где $a \ldots d$ действительные числа.

Видим четыре независимых действительных параметра. И следующие четыре (эрмитовы, линейно независимые) матрицы своими линейными комбинациями могут дать любую матрицу приведенного вида:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{bmatrix}.$$

Вот и ответ: пространство четырехмерно.

Матрицы Паули

Продолжая сюжет последней задачи, отметим, что в качестве базиса могут быть взяты и другие матрицы, лишь бы были линейно независимыми. Приведенная в решении система неудобна тем, что две первые матрицы вырождены (определитель равен нулю). Лучше за базис взять несколько иную систему матриц, определитель каждой из которых равен по модулю 1:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Они называются *матрицами Паули*. Обозначения, соответственно: $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$. Матрицы примечательны: помимо того, что эрмитовы, они еще и унитарны! Хотя (кроме единичной σ_0) не являются специальными унитарными матрицами: определитель равен минус 1.

Теперь вспомним, что для унитарных операторов эрмитово сопряжение эквивалентно обращению оператора. Поскольку матрицы Паули самосопряжены, их повторное применение к вектору возвращает его в исходное состояние. То есть:

$$\sigma_k^2 = I .$$

Разумеется, утверждение можно проверить и прямым перемножением.

Операторы, выражаемые матрицами Паули, являются обратными себе же! Интересно, правда? В некотором смысле можно сказать, что все матрицы Паули представляют собой квадратные корни из единицы.

Бра- и кет-векторы

Вообще-то запись $\left\langle \hat{A}x, y \right\rangle$ сомнительна: сто раз упоминалось, что сомножители скалярного произведения неравноправны. В матричной интерпретации – есть смысл считать первый сомножитель вектором-строкой, а второй вектором-столбцом.

Но в таком случае умножение $\hat{A}$ на x слева бессмысленно, число столбцов в первом сомножителе не равно числу строк во втором:

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n \end{bmatrix} \text{ – не существует!}$$

Умножать следует справа: не $\left\langle \hat{A}x, y \right\rangle$, а $\left\langle x\hat{A}, y \right\rangle$.

В очередной раз уместно подчеркнуть: в общем случае x и y относятся к разным пространствам! Вот и в прикладных задачах мы всегда встречаем скалярное перемножение разнородных величин. Например, механическая работа это скалярное произведение силы на перемещение: $dA = \left\langle F, ds \right\rangle$. Перемещение – вектор в обычном геометрическом пространстве, а сила это вектор в пространстве сил, то есть в другом! Там и единицы измерения иные… Информация к размышлению.

Вспомним также, что формула через компоненты: $\left\langle x, y \right\rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots$ – верна только в прямоугольных координатах. Чтобы в произвольных координатах пользоваться аналогичным выражением, один из векторов (*ковектор*) мы брали не в исходной системе координат, а в иной – дуальной. Еще один факт, когда второй сомножитель рассматривается в другом пространстве! А если векторы комплексные, то другой сомножитель скалярного произведения очутился вдобавок в сопряженном пространстве.

Забегая вперед, отметим, что в квантовой механике фигурируют только эрмитовы операторы: всегда $\left\langle x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle x\hat{A}, y \right\rangle$. Здесь применима особая запись для скалярного произведения – *обозначения Дирака*: $\left\langle x | y \right\rangle$. Скобки можно разрывать, сами векторы обозначать: $\left\langle x \right|$ и $\left| y \right\rangle$, и называть, соответственно, *бра*- и *кет-векторы* (*bracket* – «скобка»). Грубо говоря, «кет» – вектор-столбец, «бра» – вектор-строка. А $\left\langle x | y \right\rangle$ как бы слияние: $\left\langle x \right| \left| y \right\rangle = \left\langle x | y \right\rangle$. Тогда естественно записывают $\left\langle x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle x\hat{A}, y \right\rangle$ просто как: $\left\langle x \right| A \left| y \right\rangle$.

Разумеется, $|x\rangle$ и $\langle x|$ в представлениях отличаются комплексным сопряжением, поскольку должно быть: $\langle x|x\rangle = \|x\|^2$. Соответственно, квадрат модуля скалярного произведения (величина в квантовой механике важнейшая!) выражается как $\langle x|y\rangle\langle y|x\rangle$, что эквивалентно $\langle x, y\rangle\langle x, y\rangle^* = |\langle x, y\rangle|^2$.

Проектор

Особые виды линейных операторов называются проекционными. Идея исходит из привычного понятия проектирования вектора.

Представим евклидово пространство X в виде *прямой суммы* двух подпространств: $X = A \oplus A^{\perp}$. Соответственно, вектор $x \in X$ в виде суммы: $x = x' + x''$, где $x' \in A$, $x'' \in A^{\perp}$. Назовем x' проекцией x на подпространство A. Но и x'' тоже является проекцией x – на подпространство $A^{\perp}$.

Чаще всего, хотя и не обязательно, будем рассматривать проекцию на одномерное пространство (на ось). Вспомним, что вообще вектор представляется как сумма всех своих проекций на оси координат:

$$x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + x_3 e_3 + ... = \sum_k x_k e_k ,$$

где $x_k = \langle e_k, x\rangle$. Заметьте: единичный вектор стоит на первом месте, он всегда ковектор, в дираковской нотации – бра-вектор.

Таким образом, проекция на k-ю ось равна: $\hat{P}_k x = x_k e_k = \langle e_k, x\rangle e_k$, а $x = \sum_k \hat{P}_k x$. Символом $\hat{P}$ мы обозначили *оператор проектирования*, или *проектор*. Как отмечено, если $\hat{P}$ проектор, то $I - \hat{P}$ тоже проектор. Но только уже, возможно, не на ось…

Попробуем применить оператор проектирования повторно. Имеем:

$$\hat{P}_k \hat{P}_k x = \langle e_k, \hat{P}_k x\rangle e_k = \langle e_k, \langle e_k, x\rangle e_k\rangle e_k .$$

Число $\langle e_k, x\rangle$ можно вынести наружу:

$$\hat{P}_k \hat{P}_k x = \langle e_k, x\rangle\langle e_k, e_k\rangle e_k .$$

Но $\langle e_k, e_k\rangle = 1$, так что получаем $\langle e_k, x\rangle e_k$, то есть, $\hat{P}_k x$. Доказали, что $\hat{P}_k \hat{P}_k x = \hat{P}_k x$, или:

$$\hat{P}\hat{P} = \hat{P} . \qquad (2.15)$$

Вполне естественно: повторная проекция проекции на ту же самую ось не меняет результат (свойство *идемпотентности*). Соотношение (2.15) принимают даже за определение проекционного оператора.

Пусть $x = (x_1, x_2, ... x_k, ... x_n)$. Как должен выглядеть вектор – проекция x на k-ю ось? Мы уже знаем, как: $x_k e_k = (0, 0, ... x_k, ... 0)$. Очевидно, матрица проектора будет иметь все нули, и одинокую единицу – на k-м месте диагонали:

$$P_k = \begin{bmatrix} 0 & 0 & ... & 0 \\ 0 & ... & ... & 0 \\ ... & ... & 1 & ... \\ 0 & 0 & ... & 0 \end{bmatrix} . \qquad (2.16)$$

Может быть и несколько единиц, к примеру, если проектирование идет на плоскость (в пространстве размерностью больше 3 это будет *гиперплоскость*). Как сказано, по умолчанию будем рассматривать проекции лишь на оси, своеобразные «кванты» проектирования. Заметим, что след матрицы такого проектора (сумма элементов главной диагонали) равен единице – информация пригодится!

Кстати, в $x = \sum_k \hat{P}_k x$ – можно сократить x слева и справа, поскольку тождество справедливо для любых x. Получится: $I = \sum_k \hat{P}_k$ – сумма проекторов на все оси дает единичный оператор, не изменяющий вектора. Формулу иногда называют *разложением единицы*. Впрочем, в матричном представлении она очевидна. Ясно, что и сумма любого числа проекторов – проектор.

Заметим, что оператор проектирования тоже эрмитов, $\left\langle x, \hat{P}y \right\rangle = \left\langle \hat{P}x, y \right\rangle$! Проверим: $\left\langle x, \hat{P}y \right\rangle = \left\langle e_k, \left\langle e_k, y \right\rangle x \right\rangle$. Так как $\left\langle e_k, y \right\rangle$ – число, его можно вынести наружу, получив: $\left\langle x, \hat{P}y \right\rangle = \left\langle e_k, y \right\rangle \left\langle e_k, x \right\rangle$. Ровно то же самое выйдет и из $\left\langle \hat{P}x, y \right\rangle$.

Конечно, эрмитовость видна из собственно матрицы… Но и выкладки полезны: в бесконечномерных пространствах на матрицы кивать уже не приходится.

Задача. Операторы $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ – проекторы. Является ли проектором оператор $\hat{P} = \hat{P}_1 \hat{P}_2$?

Проверим условие (2.15). $\hat{P}^2 = \hat{P}_1 \hat{P}_2 \hat{P}_1 \hat{P}_2$. Если $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ коммутируют, их можно поменять местами, и тогда:

$$\hat{P}^2 = \hat{P}_1 \hat{P}_1 \hat{P}_2 \hat{P}_2 = \hat{P}_1 \hat{P}_2 = \hat{P}.$$

Ответ: является, только если $\hat{P}_1$ и $\hat{P}_2$ перестановочны.

Представление проектора

Проектировать необязательно на ось координат, можно на произвольное направление. Проектор x на направление единичного вектора y предстанет в виде:

$$\hat{P}_y x = \left\langle y, x \right\rangle y.$$

Разумеется, если $y \neq e_k$ (не является ортом принятого базиса), матрица непохожа на (2.16) – она по сути дела преобразована к другим координатам. Как должна выглядеть матрица проектора в общем случае?

Для начала, она всегда вырождена (определитель равен нулю), ведь оператор проектирования не имеет обратного: различные векторы дадут одну и ту же проекцию.

Но это не означает, что любой оператор с вырожденной матрицей является проектором! Сюжет, который рассмотрим в качестве задачи.

Задача. Матрица:

$$\begin{bmatrix} 8 & 6 \\ 4 & 3 \end{bmatrix}$$

– имеет нулевой определитель. Проверить, соответствует ли она проекционному оператору.

Попросту, требуется проверить равенство (2.15). Аккуратно перемножим две матрицы:

$$\begin{bmatrix} 8 & 6 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 8 & 6 \\ 4 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 88 & 66 \\ 44 & 33 \end{bmatrix}.$$

Равенство (2.15) не соблюдается – матрица не проектор.

Что, очевидно, легко поправить: достаточно поделить исходную матрицу на 11. Проектору соответствует матрица:

$$\begin{bmatrix} 8/11 & 6/11 \\ 4/11 & 3/11 \end{bmatrix}.$$

Откуда взялось число 11? Очень просто: оно – след первоначальной матрицы ($8+3=11$). А след новой матрицы равен $8/11+3/11=1$, как и должно быть. Мы отмечали, что в диагональном виде матрица проектора имеет единичный след, а значит – и в любом виде: след при переходе к другим координатам (при унитарных преобразованиях) не меняется.

Из задачи видно, что матрица с нулевым следом, хотя бы и имела нулевой определитель, никак не могла быть приведена к проектору. Показательный пример:

$$\begin{bmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$ при любом a (так называемая *нильпотентная* матрица).

Полезно записать проектор на направление единичного вектора $\hat{P}_y x = y\langle y, x\rangle$ в дираковской нотации:

$$\hat{P}_y|x\rangle = |y\rangle\langle y|x\rangle.$$

Сопоставляя левую и правую части, обнаруживаем, что странноватая конструкция $|y\rangle\langle y|$, как оказывается, означает оператор проектирования на вектор y (при условии, что он нормирован). Стоит запомнить!

3. Понятие о спектрах

Разбираемся со спектральной теорией. Излагаемое может поначалу показаться просто курьезом. Однако в линейной алгебре нет темы важнее.

Ядро оператора

Рассмотрим уравнение:

$\hat{A}x = 0$. (3.1)

Найти *x*.

Напрашивается тривиальное: $x = 0$ (оператор-то линейный). Однако не факт, что не существует и других, ненулевых решений.

Не раздумывая долго, подействуем на (3.1) обратным оператором:

$\hat{A}^{-1}\hat{A}x = \hat{A}^{-1}(0)$, или $x = \hat{A}^{-1}(0)$.

Задача как бы «решена»… но линейная операция над нулевым вектором дает ведь ноль, а ответ $x = 0$ нас не устраивает. Прием оказался напрасным? Отнюдь нет, он принес крайне важный результат: уравнение (3.1) может иметь ненулевое решение… но только в том случае, если $\hat{A}^{-1}$ *не существует*.

Отметим себе, что множество значений *x*, удовлетворяющее условию (3.1) – именно то, что мы хотим отыскать – называется *ядром (*или *нуль-пространством)* оператора $\hat{A}$, и обозначается $\ker \hat{A}$ (*kernel* – ядро).

Распишем задачу детально. Найти такое $x \neq 0$, чтобы для заданного оператора $\hat{A}$ выполнялось:

$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + ... + A_{1n}x_n = 0$,

$A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + ... + A_{2n}x_n = 0$, (3.1a)

…

$A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + ... + A_{nn}x_n = 0$.

Задачка вроде бы школьная: система *n* уравнений с *n* неизвестными $x_1, x_2, ..., x_n$. Она, как известно, решается… и дает тривиальные корни $x_1 = x_2 = ... = x_n = 0$.

Нет, придется подойти к вопросу иначе. Мы пока не знаем решений, но кое-что можно о них сказать.

Во-первых, если некоторый $x \neq 0$ удовлетворяет уравнению (3.1), то ему удовлетворяет также и λx, из соображений линейности.

Во-вторых, если уравнению удовлетворяют два вектора x_1 и x_2: $\hat{A}x_1 = 0$, $\hat{A}x_2 = 0$, тогда:

$\hat{A}(x_1 + x_2) = \hat{A}x_1 + \hat{A}x_2 = 0$.

Ему удовлетворяет и их сумма!

Вывод: ядро оператора (если оно больше, чем просто ноль) является линейным подпространством.

Перейдем собственно к решению. Предположим, требуемый *x* с компонентами x_k найден. Представим столбцы матрицы оператора в виде векторов, и запишем (3.1a) так:

$$\begin{bmatrix} A_{11} \\ A_{21} \\ \dots \\ A_{n1} \end{bmatrix} x_1 + \begin{bmatrix} A_{12} \\ A_{22} \\ \dots \\ A_{n2} \end{bmatrix} x_2 + \dots + \begin{bmatrix} A_{1n} \\ A_{2n} \\ \dots \\ A_{nn} \end{bmatrix} x_n = 0 .$$

Уравнение ничего не напоминает? Это же формулировка *линейной зависимости* векторов A_k! Если не все x_k равны нулю (а таково условие), то любой из столбцов A_k может быть представлен линейной комбинацией остальных.

Оказывается, если предположить, что ненулевое решение для $x = \ker \hat{A}$ существует, то столбцы матрицы A линейно зависимы. Подобную матрицу именуем вырожденной, определитель ее равен нулю, обратной не существует.

Пример, знакомый по одной из задач:

$$A = \begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -15 & 3 \end{bmatrix}.$$

Уравнению (3.1) будет удовлетворять, например, вектор $x = (1, 5)$. Или $x = (8, 40)$. Короче, любой вектор, для которого $x_2 = 5x_1$. Бесконечное множество решений? Но мы же доказали, что ядро – множество векторов, линейное подпространство, если только оно не заключено в одной точке: в нуле. (Впрочем, и она составляет линейное подпространство, только нулевой размерности).

Итак, $\hat{A}x = 0$ имеет ненулевые решения, только если оператор $\hat{A}$ не имеет обратного. Иначе и быть не может, если разным x соответствует одно и то же (нулевое) значение y. Оператор $\hat{A}$ должен быть *не инъективен*.

Собственные значения

Двинувшись далее, снова рассмотрим линейный оператор $\hat{A}$: $y = \hat{A}x$. Теперь вопрос посложнее – существуют ли такие x, что:

$$\hat{A}x = \lambda x, \qquad (3.2)$$

где λ – число? Здесь также поспешный ответ: $x = 0$ отклоняется.

Иными словами, может ли найтись такой ненулевой вектор x, что действие на него оператора $\hat{A}$ сводится попросту к умножению на константу?

Приведем (3.2) к знакомой форме (3.1):

$\hat{A}x - \lambda x = 0$, или $(\hat{A} - \lambda)x = 0$.

Говоря иначе, требуется найти $x = \ker(\hat{A} - \lambda)$. Но тогда и ответ готов: ненулевые x, удовлетворяющие (3.2), существуют, если оператор $(\hat{A} - \lambda)$ не имеет обратного.

Попрактикуемся на примере. Возьмем оператор:

$y_1 = 5x_1 - x_2$,

$y_2 = -4x_1 + 6x_2$,

матрица которого:

$$\begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -4 & 6 \end{bmatrix}.$$

Мы хотим, чтобы:

$$5x_1 - x_2 = \lambda x_1,$$
$$-4x_1 + 6x_2 = \lambda x_2.$$

Группируем:

$$\begin{aligned} &(5-\lambda)x_1 - x_2 = 0, \\ &-4x_1 + (6-\lambda)x_2 = 0. \end{aligned} \qquad (3.2\text{a})$$

С подобными уравнениями мы знакомы, не так ли? Это же наша школьная задачка, вот для чего она была нужна. Как раз и имеем: $(\hat{A} - \lambda)x = 0$.

Ненулевые решения существуют, если определитель матрицы $A - \lambda$ равен нулю. Ясно, что λ предстает здесь также в виде матрицы, как λI :

$$\begin{bmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{bmatrix}.$$

Что же, запишем определитель:

$$\begin{vmatrix} 5-\lambda & -1 \\ -4 & 6-\lambda \end{vmatrix}.$$

Вычисляем и приравниваем к нулю:

$$(5-\lambda)(6-\lambda) - 4 = 0.$$

Имеем квадратное уравнение относительно λ. А вообще его степень будет, очевидно, такова, каков размер матрицы. Оно называется характеристическим уравнением, а его левая часть – *характеристическим полиномом*.

Ничто не мешает вычислить корни уравнения:

$$\lambda_1 = 3{,}44, \ \lambda_2 = 7{,}56.$$

Заметьте себе ход вычислений: он еще не раз пригодится.

Оказывается, задача, поставленная вначале, имеет решение для двух значений λ. Полученные величины λ_k называются *собственными значениями* данного оператора (иногда говорят: *собственные числа*). Собственные значения оператора $\hat{A}$ это такие числа λ, при которых оператор $(\hat{A} - \lambda)$ не инъективен (при разных *x* дает одинаковые *y*), а значит, не имеет обратного.

Набор собственных значений оператора составляет его *спектр*. Спектр нашего оператора *точечный* (иногда называют: *дискретный*, но, говоря строго, это не вполне одно и то же). Он образован двумя числами: $\lambda_1 = 3{,}44$ и $\lambda_2 = 7{,}56$.

А $\hat{A}x = \lambda x$ называют нередко *основным уравнением теории линейных операторов*, или *уравнением проблемы собственных значений* (термин *Eigenwertproblem, EWP* пришел из немецкой литературы).

Конечно, запись (3.2) не слишком корректна. Оператор $\hat{A}$ меняет индексацию вектора (например, $j \to k$), а умножение на число – не меняет. Строго говоря, положено избегать смешения числа с оператором, и записывать: $\hat{A}x = \lambda I x$, $(\hat{A} - \lambda I)x = 0$. Держа это в голове, мы предпочтем все же простоту.

Собственные векторы

Половина задачи решена. Осталось разобраться, наконец, какие *x* удовлетворяют уравнению (3.2). Возьмем любое из уравнений (3.2а) (они равносильны, раз определитель нулевой), например:

$(5-\lambda)x_1 - x_2 = 0$.

Подставим в него первое из собственных значений: $\lambda_1 = 3{,}44$. Получим:

$1{,}56x_1 - x_2 = 0$, $\dfrac{x_2}{x_1} = 1{,}56$.

Ответ означает, что условие (3.2) выполняется для множества векторов, удовлетворяющих уравнению $1{,}56x_1 = x_2$. Любой вектор вида:

$$\begin{bmatrix} 1{,}56z \\ z \end{bmatrix}$$

– назовется *собственным вектором* данного оператора $\hat{A}$. Здесь z – произвольное число (может быть и комплексным!)

Все собственные векторы, соответствующие одному значению λ, отличаются попросту множителями. Одному собственному значению λ соответствует не один, а линейное подпространство собственных векторов. Что, впрочем, мы знали заранее. Называется: *собственное подпространство* оператора.

Второе собственное значение: $\lambda_2 = 7{,}56$. Получим для собственных векторов:

$\dfrac{x_2}{x_1} = -2{,}56$.

Второе собственное подпространство образовано всеми векторами вида:

$$\begin{bmatrix} z \\ -2{,}56z \end{bmatrix}.$$

Подведем итог. Мы искали векторы, удовлетворяющие определенному уравнению. Типичная задача для практики, не так ли? Например, приходится искать решения дифференциальных уравнений… Как оказалось, в ходе решения возникает промежуточный этап: требуется получить некоторые числа – собственные значения оператора. Запомним!

Задача. Убедитесь, что на самом деле:

$$\begin{bmatrix} 5 & -1 \\ -15 & 3 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} z \\ -2{,}56z \end{bmatrix} = 3{,}44 \cdot \begin{bmatrix} z \\ -2{,}56z \end{bmatrix}.$$

Для чего это нужно

Предположим, что x' – какой-то из собственных векторов оператора $\hat{A}$. Поскольку $\hat{A}x' = \lambda x'$, значит: $y' = \hat{A}x'$ (перемножение матриц) можно заменить на $y' = \lambda x'$ (умножение на число). Здесь λ – собственное значение, которому соответствует x'. То есть, если x' подан «на вход» оператора, выходной вектор найти очень просто: достаточно умножить на число, вот так фокус!

А если исходный вектор не является собственным? Не беда, возможно, что он раскладывается на сумму собственных.

Предположим, что оператор $\hat{A}$ в n-мерном пространстве имеет n собственных значений $\lambda_1 \ldots \lambda_n$, и, соответственно, n относящихся к ним собственных векторов $x'_1 \ldots x'_n$. (На самом деле – n собственных подпространств, но из каждого подпространства мы берем один вектор: единичный).

Примем допущение: $x'_1 \ldots x'_n$ линейно независимы. Тогда они образуют базис, который переобозначим традиционно $e_1 \ldots e_n$. Произвольный вектор x (так называемый *суперпозиционный*) представляется как линейная комбинация (*суперпозиция*) базисных:

$$x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + \ldots$$

Воздействие оператора на каждое слагаемое – это умножение на число. Результаты просто складываем. Получить искомое опять просто:

$$y = \hat{A}x = \lambda_1 x_1 e_1 + \lambda_2 x_2 e_2 + \ldots \qquad (3.3)$$

Снова обошлись без умножения матриц!

Что мы сделали? Вектор x разложили по собственным подпространствам оператора $\hat{A}$. Каждое слагаемое $x_k e_k$ является проекцией x на k-е собственное подпространство (на «ось координат»).

Наш оптимизм опирался на искусственное предположение о линейной независимости системы собственных векторов… Хорошая новость: в практически важных случаях так и оказывается (об этом далее).

Природа линейного оператора

Можно вообразить, что собственные значения и собственные векторы нужны для упрощения вычислений… Нет, разумеется! Найти собственные значения – уже непростая задача, «проблема собственных значений». К тому же в эпоху компьютеров вопросы вычислений уходят на задний план. Все описанное важно и нужно совсем по другим причинам. Мы сформулируем их в виде выводов.

1. Линейный оператор как бы «несет в себе» особую систему координат – набор собственных подпространств (собственных векторов, которые можно взять за координатные орты). В общем случае такие векторы комплексные, не взаимно ортогональные, и не принадлежат действительному пространству, даже если именно в нем оператор задан изначально.

Однако именно в этих координатах (в *собственном представлении*) удобно рассматривать задачи с участием данного оператора.

2. Линейный оператор «несет в себе» и само пространство, в котором он действует. Им является комплексное пространство, натянутое на собственные векторы. То есть, образованное всевозможными линейными комбинациями собственных векторов.

3. В своих собственных координатах линейный оператор рассыпается (матрица принимает диагональный вид), превращаясь в набор коэффициентов – собственных значений:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \ldots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{bmatrix}. \qquad (3.4)$$

4. Как известно, базисные векторы в *собственном представлении* всегда имеют вид:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \ldots \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \ldots \\ 0 \end{bmatrix}, \text{ и так далее.}$$

Значит, именно так выглядят собственные векторы линейного оператора (с точностью до коэффициента) в базисе собственных векторов оператора.

5. Из (3.4) с удивлением видим, что сам линейный оператор в n-мерном пространстве имеет не $n \times n$, как можно подумать, а только n независимых параметров. И представляется вектором с координатами $\lambda_1 ... \lambda_n$ в пространстве операторов, ортами которого являются… проекторы! (если вам последнее неочевидно, то далее еще вернемся).

Сформулированное выше позволяет сделать интересное заключение о природе линейного оператора, который был изначально введен как способ преобразования вектора в другой вектор. В итоге пришли к тому, что линейный оператор есть набор подпространств, которые образуют «оси координат», и набор некоторых чисел – собственных значений.

В практических задачах именно эти вещи и оказываются важными!

Мы говорили, что линейный оператор – инвариантный объект, не зависимый от координатного представления. Хотя бы потому, что наиболее подходящую для себя систему координат он содержит внутри. А собственные значения, на которые он распадается в этих координатах, являются прямыми инвариантами. Ведь основное уравнение $\hat{A}x = \lambda x$ не «привязано» ни к какому координатному представлению, оно инвариантно.

Спектральное представление оператора

Пройдемся еще раз по цепочке действий, решающих задачу перевода x в y: $y = \hat{A}x$.

1. Вектор x переводим в другую систему координат: раскладываем его по собственным векторам оператора $\hat{A}$ (которые, однако, не обязаны составлять ортогональный базис). Получаем компоненты: $x(x_1, x_2, ...)$.

2. Вычисляем компоненты y – простым умножением на собственные значения $\hat{A}$:

$y_1 = \lambda_1 x_1$,

$y_2 = \lambda_2 x_2$,

…

и так далее.

3. Если необходимо, преобразуем полученный вектор y в исходные координаты.

Изложим несколько иначе.

Представили вектор x в виде суммы проекций на «собственные» оси координат (то есть, в виде суперпозиции собственных векторов оператора $\hat{A}$):

$$x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + ... = \sum_n x_k e_k .$$

Заменим теперь $x_k e_k = \hat{P}_k x$, где $\hat{P}_k$ – оператор проектирования на k-ю ось.

Тогда:

$$y = \hat{A}x = \hat{A} \sum_n x_k e_k = \sum_n \hat{A}\hat{P}_k x .$$

Но, так как $\hat{P}_k x$ это собственные векторы $\hat{A}$, $\hat{A}\hat{P}_k x$ можно заменить на $\lambda_k \hat{P}_k x$. Получаем:

$$\hat{A}x = \sum_n \lambda_k \hat{P}_k x .$$

Напрашивается идея сократить «икс»… Имеем:

$$\hat{A} = \sum_n \lambda_k \hat{P}_k \qquad (3.5)$$

– представление оператора теперь уже не в виде матрицы. А в виде вектора с координатами $\lambda_1 \ldots \lambda_n$ в n-мерном пространстве операторов (помните?), ортами которого являются проекторы $\hat{P}_k$. Линейный оператор является линейной комбинацией проекторов! Компонентами такого «вектора» являются собственные значения.

Почему комплексные числа

Выше неоднократно упоминалось: векторное пространство может быть комплексным. Что, возможно, представляется странным, надуманным, далеким от практики… Все как раз наоборот!

Мы видели, что собственные значения оператора λ_k получаются как корни характеристического полинома степени n. Но корни вполне могут оказаться комплексными! Предстоит увидеть, что даже элементарный оператор плоского поворота имеет комплексные собственные значения.

А так как в собственном базисе $y_k = \lambda_k x_k$, то выходит, что и компоненты векторов x и y – либо должны быть комплексными… либо во многих случаях (даже в большинстве случаев!) аппарат спектров неприменим.

Разумеется, выбор в пользу первого варианта.

Природа линейных операторов комплексная. Потому, как правило, векторы рассматриваются в комплексных пространствах (над полем комплексных чисел). Соответственно – и компоненты векторов, и скалярное произведение (если оно существует) – комплексные числа.

Допустим, тем не менее, что оператор изначально задан в действительном векторном пространстве – матрицей из n^2 действительных параметров. Как мы теперь знаем, его можно «пересадить» в комплексное пространство (разложить по собственным векторам). Диагональная матрица оператора будет иметь n комплексных элементов, а значит, $2n$ действительных параметров.

Как будто потеряли часть информации… Нет, конечно: ведь информацию несут также собственные векторы, так как их базис необязательно ортогонален.

Тем не менее, изначальная матрица в ортогональном базисе не может быть произвольной, она имеет ряд инвариантов. Про некоторые мы узнали: собственные значения. Еще один инвариант – определитель матрицы (впрочем, не «еще один»: определитель равен просто произведению собственных значений). Еще один – след матрицы (сумма элементов главной диагонали, следовательно, сумма собственных значений).

4. Работаем со спектрами

Получив начальное представление о спектрах, потренируемся теперь с нахождением собственных значений и собственных векторов различных операторов. А закончим раздел иллюстрацией эффективности спектральной теории.

Спектры некоторых операторов

Рассмотрим знаменитые операторы. Очевидно, что единичный оператор и оператор умножения на число являют собой вырожденные случаи: для них любой вектор является собственным, а чему равно собственное значение – понятно.

Возьмем проектор (на k-ю ось):

$$P_k = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 1 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}.$$

Матрица изначально имеет диагональный вид, так что и думать не надо: собственные значения лежат на диагонали, и они двух видов: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 0$. В самом деле, проекция не изменяет направления вектора в двух случаях:

1) вектор уже лежит на оси, на которую и проектируем. Проектор с ним ничего не делает – умножение на 1;

2) вектор лежит на направлении проекции (ортогонален оси, на которую проектируем). Он проектируется в точку (нулевой вектор) – умножение на 0.

Вот простейший случай – проектор на плоскости: $\hat{P}_x$ (проекция на ось X), или $\hat{P}_y$ (на ось Y). В матричной форме:

$$P_x = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},\ P_y = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Собственными подпространствами каждого являются обе оси: X и Y. Получилось, что проектор изначально и задан в собственных координатах!

Как мы знаем, собственные векторы в собственном представлении имеют стандартный вид базисных, в данном случае:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ и } \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Естественно, любое число на месте единицы тоже даст собственный вектор, что не стоило бы пояснять всякий раз. (Как правило, собственный вектор принимаем нормированным на единицу.)

Если проектирование идет не на ось координат, значит, мы рассматриваем проектор не в собственном представлении, а в повернутом базисе. Собственные векторы, естественно, будут выглядеть иначе. Ну а собственные значения инвариантны.

Спектр унитарного оператора

Унитарный оператор, изменяющий направление вектора, кажется, никак не может удовлетворить уравнению (3.2), разве что в исключительных случаях (поворот на $n\pi$). При действительном λ так оно и есть. Но спектр унитарного оператора вообще-то комплексный.

Берем знакомый оператор плоского поворота на угол α:

$$U = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix}.$$

Проделаем известные выкладки:

$$|U - \lambda| = \begin{vmatrix} \cos\alpha - \lambda & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha - \lambda \end{vmatrix} = 0,$$

$$(\cos\alpha - \lambda)^2 + \sin^2\alpha = 0.$$

Получили уравнение: $\lambda^2 - 2\lambda\cos\alpha + 1 = 0$, которое дает два корня:

$\lambda_1 = \cos\alpha + i\sin\alpha$, $\lambda_2 = \cos\alpha - i\sin\alpha$. Или, в общепринятой компактной форме:

$\lambda_1 = e^{i\alpha}$, $\lambda_2 = e^{-i\alpha}$.

Заметим: модуль всех собственных значений равен единице. Что естественно для унитарного оператора, не изменяющего модуль вектора. Ну а при $\alpha = n\pi$ имеем ±1, как и ожидалось.

Коэффициенты вида $e^{i\alpha}$, $e^{-i\alpha}$ будут фигурировать всюду, где есть унитарные преобразования, они называются *фазовыми множителями*.

По здравому размышлению ясно, что любой унитарный оператор не может иметь в качестве собственных значений никаких иных чисел, кроме как с единичным модулем (то есть, вида $e^{i\varphi}$), запомните данный факт. Ведь оператор (а значит, и умножение на его собственное значение) не вправе изменять модуль вектора.

В базисе собственных векторов матрица оператора $\hat{U}$ предстанет диагональной:

$$U = \begin{bmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{bmatrix}. \qquad (4.1)$$

Оператор повернет каждую компоненту вектора, как комплексное число, в комплексной плоскости на угол α (в противоположные стороны).

Переходя к нахождению собственных векторов, поступим точно так же, как делали ранее. Например, для λ_1:

$$x_1\cos\alpha - x_2\sin\alpha = \lambda_1 x_1.$$

Подставляя $\lambda_1 = \cos\alpha + i\sin\alpha$, получаем: $x_1 = ix_2$. То есть, речь идет о векторах вида: $x = \begin{bmatrix} iz \\ z \end{bmatrix}$, они-то и будут собственными. Здесь z – произвольное число. Проверим, перемножив аккуратно:

$$\hat{U}x = \begin{bmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} iz \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} iz(\cos\alpha + i\sin\alpha) \\ z(\cos\alpha + i\sin\alpha) \end{bmatrix} = xe^{i\alpha} = \lambda_1 x_1.$$

Все сошлось. Для $\lambda_2 = \cos\alpha - i\sin\alpha$ аналогичным образом получим, что второе собственное подпространство состоит из векторов вида: $x = \begin{bmatrix} -iz \\ z \end{bmatrix}$.

Не ожидали от тривиального плоского поворота? Настоящая природа оператора оказалось комплексной, так же, как и пространство, присущее ему.

Еще одно примечательное свойство. Скалярное произведение собственных векторов:

$$iz(-iz)^* + zz^* = iz(-i)^* z^* + zz^* = 0.$$

Собственные векторы ортогональны! Диагональное представление оператора – оно, как оказалось, в ортогональном базисе (но в комплексном). В вещественном базисе оператор непредставим диагональной матрицей.

Исследуем унитарный оператор

Унитарные операторы играют громадную роль в физике, потому возвращаемся к ним снова и снова. Разберемся, как будет выглядеть наша матрица (4.1) в собственном базисе для различных поворотов. Кстати, как и всегда, собственные векторы в собственном представлении имеют вид:

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \text{ и } \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Оператор превратит их соответственно в $\begin{bmatrix} e^{i\alpha} \\ 0 \end{bmatrix}$ и $\begin{bmatrix} 0 \\ e^{-i\alpha} \end{bmatrix}$, то есть, умножит на собственные значения.

Повороты на углы $\alpha = 0$ и $\alpha = \pi$ ожидаемо равноценны действию единичного оператора I и $-I$. А вот четверть оборота ($\alpha = \pi/2$) демонстрирует любопытный результат:

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

Любой вектор $x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ после поворота «на 90°» предстанет в виде:

$$\begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ix_1 \\ -ix_2 \end{bmatrix}.$$

Задача. Доказать, что любой вообще унитарный оператор имеет ортогональные собственные векторы, если они соответствуют разным собственным значениям.

Определение унитарного оператора:

$$\left\langle \hat{U}x_j, \hat{U}x_k \right\rangle = \left\langle x_j, x_k \right\rangle.$$

Если x_j, x_k – любая пара собственных векторов, можно согласно основному уравнению (3.2) записать:

$$\left\langle \lambda_j x_j, \lambda_k x_k \right\rangle = \left\langle x_j, x_k \right\rangle.$$

Числовые множители выносятся за скобки скалярного произведения:

$$\lambda_j^* \lambda_k \left\langle x_j, x_k \right\rangle = \left\langle x_j, x_k \right\rangle.$$

Равенство возможно, например, если $\lambda_j^* \lambda_k = 1$. Но отсюда прямо следует, что $\lambda_j = \lambda_k$. Только в этом случае $\lambda_j^* \lambda_k = (e^{i\varphi})^* \cdot e^{i\varphi} = e^{-i\varphi} e^{i\varphi} = 1$. Помним, что собственные значения унитарного оператора всегда лежат на единичной комплексной окружности!

Если же собственные значения различаются, остается вариант $\left\langle x_j, x_k \right\rangle = 0$, что и требовалось доказать.

<u>Спектр эрмитова оператора</u>

Нам предстоит доказать два утверждения. Первое: собственные векторы x_k эрмитова оператора ортогональны.

Доказательство аналогично только что проведенному для унитарных. Определение эрмитова оператора:

$$\left\langle \hat{A}x_j, x_k \right\rangle = \left\langle x_j, \hat{A}x_k \right\rangle.$$

Если x_j, x_k – пара собственных векторов, можно эквивалентно записать:

$$\left\langle \lambda_j x_j, x_k \right\rangle = \left\langle x_j, \lambda_k x_k \right\rangle.$$

Числа вынесем за скобки:

$$\lambda_j \left\langle x_j, x_k \right\rangle = \lambda_k \left\langle x_j, x_k \right\rangle. \qquad (4.2)$$

Равенство будет либо при $\left\langle x_j, x_k \right\rangle = 0$ (ортогональность, которую и требовалось доказать!), либо если $\lambda_j = \lambda_k$. Однако получается, что в формулировке утверждения надо опять добавить: «при условии, что все собственные значения различны».

Вообще операторы, собственные векторы которых ортогональны, называются *нормальными*. Таковыми являются эрмитовы и унитарные. Нормальность оператора весьма ценное свойство: переходя от исходного представления к представлению в системе собственных векторов, остаемся в ортогональном базисе. Просто производим унитарный поворот.

Второе утверждение: спектр эрмитова оператора действителен. Тут и доказывать нечего, ведь в базисе собственных векторов оператор превратится в диагональный – см. (3.4), а диагональ эрмитова оператора (в ортогональном базисе) всегда вещественна.

Кстати, как раз по сей причине λ_j в (4.2) вынесена из скобок без перехода к сопряженному значению, а вы думали – ошибка?

Но что делать, если все-таки имеются одинаковые собственные значения? Ведь соответствующие им собственные векторы, возможно, не ортогональны. Случай неприятный, но не смертельный. В подпространстве, соответствующем повторяющимся m раз собственным значениям, всегда можно выбрать m взаимно ортогональных векторов. По крайней мере, линейно независимых, а затем воспользоваться процедурой ортогонализации (известная *процедура Грама-Шмидта*).

Задача 1. Найти эрмитов оператор, имеющий собственные значения: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = -1$.

Ответ содержится в вопросе. В базисе (ортогональном!) собственных векторов искомый оператор именно так и должен выглядеть:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \text{ или } \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

А сами собственные векторы? Как и всегда в собственном представлении: $\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ и $\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. На всякий случай проверим:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \lambda_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix}\times\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ -1\end{bmatrix}=\lambda_2\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix}.$$

Сходится!

Оператор, полученный в задаче, соответствует одной из матриц Паули, а именно σ_3. То, что он выглядит именно так – частность, обусловленная выбором представления в базисе собственных векторов. Нетрудно прикинуть, что матрицы σ_1 и σ_2 имеют те же самые собственные значения: -1 и 1. Следовательно, все они соответствуют в сущности одному и тому же оператору.

Задача 2. Доказать, что оператор $\hat{U}=\exp(i\hat{A})$ унитарен, если $\hat{A}$ эрмитов.

Можно было бы записать: $\hat{U}=e^{i\hat{A}}$, символика $\exp$ позволит избежать «трехэтажности» формул.

Между прочим: не смущает оператор в показателе экспоненты?

Уже говорилось, что для линейных операторов определены алгебраические операции, можно составлять многочлены и ряды. А экспонента представляется рядом Тейлора. Так что запись законная.

Теперь к сути задачи. Пусть $\hat{A}$ имеет собственные векторы x_k и соответствующие собственные значения λ_k. Тогда для любого из x_k можем записать:

$$\hat{U}x_k=\left[\exp(i\hat{A})\right]x_k=\exp(i\lambda_k)x_k=\mu_k x_k.$$

Оказалось, что x_k являются собственными векторами и для $\hat{U}$ тоже! А его собственными значениями будут: $\mu_k=\exp(i\lambda_k)$. Заметьте: подобное верно и при другой функциональной зависимости одного оператора от другого, необязательно экспоненциальной.

Настал момент вспомнить, что $\hat{A}$ эрмитов. Сразу выводы:

1) собственные векторы $\hat{U}$ также взаимно ортогональны;

2) так как λ_k действительные числа, все $\mu_k=\exp(i\lambda_k)$ (собственные значения $\hat{U}$) имеют стандартный вид лежащих на комплексной единичной окружности.

Перечисленным пунктам отвечает только унитарный оператор.

Кое-что о коммутаторе

Мы упоминали оператор вида $\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$, назвав его *коммутатором* операторов $\hat{A}$ и $\hat{B}$. Он имеет особое обозначение:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}.$$

Очевидно, что $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=-\left[\hat{B},\hat{A}\right]$ (антикоммутативность). Если же $\hat{A}$ и $\hat{B}$ коммутируют ($\hat{A}\hat{B}=\hat{B}\hat{A}$), то $\left[\hat{A},\hat{B}\right]=0$. Тем более, всегда $\left[\hat{A},\hat{A}\right]=0$.

Забегая вперед, множество, на котором задана сумма и коммутатор, называется *алгеброй Ли*. В случаях, когда обычное умножение не перестановочно, замена произведения на коммутатор делает все же такое «умножение» почти коммутативным – хотя бы с точностью до знака.

Рассмотрим важный случай: операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ имеют одни и те же собственные векторы. (Разумеется, собственные значения не обязаны совпадать…)

Если вектор x имеет в базисе собственных векторов $\hat{A}$ компоненты $x(x_1, x_2, ...)$, то $\hat{A}x$ может быть представлен в нем так:

$\hat{A}x = \lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 + \ldots$, где λ – соответствующие собственные значения $\hat{A}$.

Так как базис собственных векторов общий, то для $\hat{B}\hat{A}x$ получаем:

$$\hat{B}\hat{A}x = \mu_1\lambda_1 x_1 + \mu_2\lambda_2 x_2 + \ldots, \qquad (4.3)$$

где μ – собственные значения $\hat{B}$.

Умножение чисел коммутативно, следовательно, $\hat{A}\hat{B}x = \hat{B}\hat{A}x$. Итак, если операторы имеют одни и те же собственные векторы, они коммутируют! Справедливо и обратное: из $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ следует совпадение собственных векторов.

Задача 1. Доказать, что унитарные операторы в $\mathbb{R}^2$ коммутируют.

> Что двумерные повороты допустимо менять местами – известно «из жизни». Можно, конечно, ради проверки затеять кропотливое перемножение матриц… А можно поступить проще. Ранее были найдены собственные векторы для унитарных операторов:
>
> $$\begin{bmatrix} iz \\ z \end{bmatrix} \text{ и } \begin{bmatrix} -iz \\ z \end{bmatrix},$$
>
> где z – любое число. Оказывается, собственные векторы никак не зависят от угла поворота α. А значит, для всех операторов едины. Чем доказательство и исчерпывается.

Если коммутирующие $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы (как бывает в квантовой механике), то оператор $\hat{C} = \hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$ тоже эрмитов: имеет те же самые (взаимно ортогональные) собственные векторы, и вещественные собственные значения, равные $\mu_1\lambda_1$, $\mu_2\lambda_2$ и так далее.

Представляет интерес вопрос об эрмитовости ненулевого коммутатора, когда $\hat{A}$ и $\hat{B}$ эрмитовы. Запишем скалярное произведение $\left\langle x, (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})y \right\rangle$, и попытаемся привести его к $\left\langle (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})x, y \right\rangle$. Для начала:

$$\left\langle x, (\hat{A}\hat{B}y - \hat{B}\hat{A}y) \right\rangle = \left\langle x, \hat{A}\hat{B}y \right\rangle - \left\langle x, \hat{B}\hat{A}y \right\rangle.$$

Пользуясь эрмитовостью $\hat{A}$ и $\hat{B}$, перетащим их поодиночке справа налево:

$$\left\langle x, \hat{A}\hat{B}y \right\rangle - \left\langle x, \hat{B}\hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{A}x, \hat{B}y \right\rangle - \left\langle \hat{B}x, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{B}\hat{A}x, y \right\rangle - \left\langle \hat{A}\hat{B}x, y \right\rangle = \left\langle (\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B})x, y \right\rangle.$$

Как видим, оператор, эрмитово сопряженный коммутатору, сменил знак:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^{+} = -\left[\hat{A}, \hat{B}\right].$$

Подобные операторы называют *антиэрмитовыми*. Если умножить на i, коммутатор станет эрмитовым:

$$i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^{+} = i\left[\hat{A}, \hat{B}\right].$$

Задача 2. Доказать последнее утверждение.

> Доказано: $\left\langle x, \left[\hat{A}, \hat{B}\right]y \right\rangle = \left\langle -\left[\hat{A}, \hat{B}\right]x, y \right\rangle$. Следовательно:
>
> $$\left\langle x, i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]y \right\rangle = \left\langle -\left[\hat{A}, \hat{B}\right]x, iy \right\rangle.$$
>
> Осталось перенести множитель i справа налево. Как известно, необходимо взять от него комплексное сопряжение; в данном случае заменить i на $-i$:

$\left\langle -\left[\hat{A}, \hat{B}\right]x, iy \right\rangle = \left\langle i\left[\hat{A}, \hat{B}\right]x, y \right\rangle$.

Вот и все.

Задача 3. Найти собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{A}^2 = \hat{A}\hat{A}$.

Любой оператор $\hat{A}$ коммутирует сам с собой. Из (4.3) видно, что если он имеет собственные значения $\lambda_1, \lambda_2, \ldots$, то оператор $\hat{A}^2 = \hat{A}\hat{A}$ обладает собственными значениями: $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \ldots$ Ну а собственные векторы у него те же самые.

Снова функциональная зависимость между операторами? Такое у нас уже было – в задаче с экспонентой. Но здесь имеется некоторая особенность. Если даже $\hat{A}$ имел все разные собственные значения, то $\hat{A}^2$ может уже приобрести одинаковые (причину, думаю, пояснять излишне). А такая ситуация несет определенные трудности, о которых мы говорили применительно к эрмитовым операторам.

Обратно к обратным операторам

Спектральная теория дает новый ракурс, чтобы взглянуть на непростую проблему получения оператора, обратного данному. Действительно, вернемся к (4.3) для коммутирующих операторов:

$$\hat{B}\hat{A}x = \mu_1\lambda_1 x_1 + \mu_2\lambda_2 x_2 + \ldots$$

– в базисе их общих собственных векторов.

Мы отлично знаем, что прямой и обратный операторы перестановочны. Так что в собственном представлении $\hat{A}$ (значит, и $\hat{A}^{-1}$ тоже!) можем смело записать:

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}x = \mu_1\lambda_1 x_1 + \mu_2\lambda_2 x_2 + \ldots = Ix = x.$$

Здесь λ и μ – собственные значения прямого и обратного операторов.

Выводы очевидны:

1) обратный оператор имеет те же собственные векторы, что и прямой;

2) собственные значения прямого и обратного операторов соотносятся как $\mu = 1/\lambda$.

Если располагаем матрицей прямого оператора в собственном представлении:

$$\begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \lambda_n \end{bmatrix},$$

то сразу же известна матрица обратного:

$$\begin{bmatrix} 1/\lambda_1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1/\lambda_2 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & 1/\lambda_n \end{bmatrix}.$$

Их перемножение дает единичную матрицу, как и следует.

Не все так хорошо, как кажется: базис собственных векторов в общем случае не ортогонален, так что многие удобные инструменты не работают. Однако нам известна категория операторов (так называемые нормальные), собственный базис которых ортогонален: унитарные и эрмитовы. Приятное совпадение: как раз они чаще всего интересны.

Спектры в работе

Сейчас мы оценим эффект спектральной теории на примере. Вспомним дифференциальное уравнение унитарной эволюции квантовой системы (2.12):

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi .$$

Допустим, что оператор $\hat{H}$ задан, остается получить решение $\Psi(t)$. Простота обманчива: здесь в действительности система уравнений!

Пусть $\hat{H}$ выражается матрицей, вектор Ψ имеет компоненты $(\Psi_1, \Psi_2, ...)$. Уравнение разворачивается в следующую систему:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = (H_{11}\Psi_1 + H_{12}\Psi_2 + ...),$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = (H_{21}\Psi_1 + H_{22}\Psi_2 + ...),$$

$\ldots$

и так далее.

Проблема не в том, что уравнений много. Плохо то, что в них не разделены переменные: в каждом уравнении перемешаны Ψ_1, Ψ_2 и все остальные, и как их распутать – неясно.

Тут-то нам помогут спектры! Достаточно перевести задачу в удобную систему координат: рассмотреть ее в представлении собственных векторов оператора $\hat{H}$.

В таком представлении матрица *H* превратится в диагональную, и наши уравнения сделаются элементарными:

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_1}{\partial t} = \lambda_1 \Psi_1,$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi_2}{\partial t} = \lambda_2 \Psi_2, \text{ и так далее.}$$

Теперь решение доступно школьнику: Ψ_k – экспоненты. (Впрочем, нам еще предстоит подробно решить такую задачу.) Пример, надеюсь, подводит решительный итог теме «для чего нужны спектры».

5. Векторы в гильбертовых пространствах

Бесконечномерное евклидово пространство называют гильбертовым. Гильбертово пространство во многом схоже с обычным геометрическим, этим оно и интересно!

Простейшее гильбертово пространство

Выше мы рассматривали «арифметические векторы» – ограниченные числовые последовательности; теперь построим пространство бесконечных последовательностей: $x = (x_1, x_2, ...)$. Понятно, что оно бесконечномерно, векторы имеют бесконечное (но счетное) множество компонент. По аналогии можно ввести в нем скалярное произведение:

$$\langle x, y \rangle = \sum_k x_k^* y_k \ .$$

Тут уже не конечная сумма, а бесконечный ряд.

Но ряд вообще-то не обязан сходиться! Желая, чтобы скалярное произведение существовало, придется рассматривать пространство не любых, а особых последовательностей. Каких?

Пусть $x + y = z$, все три вектора принадлежат нашему пространству. Запишем квадрат нормы вектора *z*:

$$\sum_k z_k z_k^* = \sum_k (x_k + y_k)(x_k^* + y_k^*) = \sum_k x_k x_k^* + \sum_k y_k y_k^* + \sum_k y_k x_k^* + \sum_k x_k y_k^*, \text{ то есть:}$$

$$\|z\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2 + \sum_k y_k x_k^* + \sum_k x_k y_k^* . \qquad (5.1)$$

Условимся, что норма любого вектора существует. Тогда в (5.1) обязаны сходиться также и члены $\sum_k y_k x_k^*$ и $\sum_k x_k y_k^*$. А это скалярные произведения. Значит, для сходимости скалярного произведения достаточно сходимости нормы. Условие заодно и необходимое, так как норма (ее квадрат) сама – скалярное произведение.

Таким образом, имеем пространство бесконечных последовательностей – а именно таких, для которых ряд $\langle x, x \rangle = \sum_k x_k x_k^*$ сходится. В математике оно имеет особое обозначение: l_2.

Поскольку в пространстве определена норма, существует и *метрика* (как всегда, норма разности):

$$\rho(x, y) = \|x - y\| = \sqrt{\sum_k (x_k - y_k)(x_k^* - y_k^*)} \ .$$

Получили бесконечномерное евклидово пространство, то есть, *гильбертово*.

Базис Шаудера и базис Гамеля

Нас опять будут интересовать представления векторов в некоторых базисах, но теперь множество базисных векторов бесконечно. И понятие, скажем, *линейной независимости* ввести непросто. А ведь базис составляется обязательно из линейно независимых векторов!

Говорят: множество векторов $e_1, e_2, ...$ является базисом, если любой вектор *x* представляется единственным образом (!) в виде суммы ряда:

$$x = \sum_{k=1}^{\infty} x_k e_k , \qquad (5.2)$$

где x_k – числа (компоненты вектора, или коэффициенты разложения).

В таком смысле мы и будем понимать базис (его также называют *базисом Шаудера*).

Интересно, что бесконечный базис можно ввести иначе, не пользуясь суммированием рядов. И тогда он годится для линейных пространств, не являющихся *топологическими*, в которых сходимости может вообще не быть.

Проблемы с линейной независимостью? Так вот вам определение: бесконечная система векторов линейно независима, если любой конечный набор из нее линейно независим.

Линейно-независимую (в указанном смысле) систему векторов можно считать базисом (*базисом Гамеля*), если ее линейная оболочка совпадает со всем пространством. То есть, требуется опять же (5.2), но с поправками: во-первых, единственность представления не оговаривается; во-вторых… впрочем, продолжим позднее.

Заметьте, базис Гамеля нам не пригодится, а излагаемое полезно только для повышения эрудиции.

Базис Гамеля обладает интересными свойствами. Для начала: если базис Шаудера имеет любое гильбертово пространство, то базис Гамеля – любое вообще линейное.

Доказательство аналогично случаю конечномерных пространств. Выбираем произвольный вектор – первый в базисе (e_1), строим на нем линейную оболочку. Выбираем следующий вектор, не лежащий в данном подпространстве, включаем его в базис как e_2. Строим оболочку уже на двух векторах... И так далее. Свойство базиса Гамеля (линейная независимость) выполняется по построению.

Однако сказать «и так далее» недостаточно. Доказательство существования базиса явно опирается на *аксиому выбора*! Которая дает основание считать, что «можно выбрать», не перебирая бесконечно: существует функция выбора, она и выдаст искомый набор.

Неожиданное свойство: любой вектор пространства представим линейной комбинацией *конечного* числа базисных векторов! В самом деле, если бы было не так, подобный вектор следовало бы тоже включить в базис, по определению линейной независимости. В (5.2) множество слагаемых (ненулевых) всегда конечно – вот чего мы не договорили.

Из книги в книгу переходит эффектный пример: если числовую ось рассматривать как линейное пространство над полем *рациональных* чисел, такое пространство оказывается бесконечномерным (даже континуальной размерности). И тогда можно построить линейную функцию, являющуюся всюду разрывной. Мы не будем на это отвлекаться.

Полнота гильбертова пространства

В скалярном произведении $\langle x, y \rangle$ зафиксируем $y = y_0$. Получим зависимость некоторого числа от вектора *x*: $a = f(x) = \langle x, y_0 \rangle$. Называемую, как известно, функционалом.

Почти очевидно, что если последовательность x_k ($k \to \infty$) фундаментальна (в смысле метрики, порожденной скалярным произведением), то и a_k также фундаментальна. Доказательство элементарно.

В таком случае, если пространство *X* и не является полным, оно может быть пополнено, и функционал на пополнении, как видим, всегда существует – из-за полноты числового множества – как предел a_k. По данной причине гильбертово пространство считают всегда *полным*. Уточняем определение гильбертова пространства: это бесконечномерное евклидово пространство, к тому же полное. Или, иначе: это *банахово* (т. е. полное линейное нормированное) пространство, в котором норма введена посредством скалярного произведения.

Ряд Фурье

Переходим к представлениям векторов в бесконечномерных пространствах. Если множество векторов e_k (теперь уже бесконечное!) образует ортонормированный базис пространства, тогда любой вектор x можно представить в виде суммы ряда:

$$x = x_1e_1 + x_2e_2 + x_3e_3 + ... = \sum_k x_ke_k \,. \qquad (5.3)$$

Совокупность чисел x_k (коэффициентов разложения) является, как и ранее, представителем исходного вектора; эти числа называют *коэффициентами Фурье*, а сам ряд (5.3) – *рядом Фурье*.

Справедливыми остаются нехитрые формулы из начального раздела – только всюду надо подразумевать суммы бесконечных рядов. По причине важности, сведем наши формулы в табличку.

Таблица 1

1	$x_k = \langle e_k, x\rangle$	k-й коэффициент Фурье равен скалярному произведению вектора с k-м ортом
2	$x_ke_k = \langle e_k, x\rangle e_k$	Проекция вектора на орт равна произведению орта на коэффициент Фурье
3	$x = \sum_k x_ke_k = \sum_k \langle e_k, x\rangle e_k$	Вектор равен сумме всех своих проекций

Последнюю формулу называют иногда *формулой Фурье*.

Функциональные пространства

Последовательности это функции целочисленного аргумента k; взгляд естественно переходит и на функции непрерывного аргумента тоже.

Имеем функции вида $x(t)$. Если хотите, считайте t временем. Что вовсе не обязательно, t может быть произвольной действительной переменной.

Сразу же условимся, что будут рассматриваться комплексные (*комплекснозначные*) функции: x принимает по умолчанию комплексные значения. А иначе содержательная теория невозможна.

Будем говорить о пространстве функций, или *функциональном пространстве*, в котором функция рассматривается как точка или вектор. Такое пространство нелегко, конечно, вообразить привычным геометрическим. А свойства его будут раскрываться постепенно.

Для функций естественным образом вводится сложение, а также умножение на число (комплексное!). В результате пространство функций оказывается линейным. В данном случае говорят о линейном пространстве над полем комплексных чисел.

Функции непрерывного аргумента $x(t)$ в каком-то смысле можно рассматривать тоже как последовательности, множество элементов которых (точек функции) несчетно, представляет собой *континуум*. Пространство функций имеет не просто бесконечномерную, а даже континуальную размерность. Тем не менее, навряд ли может заинтересовать пространство всех вообще функций; мы готовы ограничиться некоторыми частными классами. Как обычно, такое сужение дает возможность ввести полезные свойства. Так что вопрос: пространство каких именно функций мы рассматриваем – неизменно будет на первом месте.

Определенная проблема в том, что не любое полезное пространство функций является гильбертовым. А собственно гильбертова пространства может не хватать в практически важных случаях.

Гильбертово пространство функций

Понятно, что прежняя формула для скалярного произведения $\langle x, y\rangle = \sum_k x_k^* y_k$ не годится. Скалярное произведение $x(t)$ и $y(t)$ должно быть уже не рядом, а интегралом:

$$\langle x, y\rangle = \int x^*(t) y(t) dt . \qquad (5.4)$$

Возникает похожий вопрос: существует ли интеграл, да и вообще: каковы пределы интегрирования? Точнее, мы желаем, чтобы интеграл существовал. Аналогично предыдущему, рассматривается пространство таких функций, для которых скалярный квадрат выражается интегралом $\|x(t)\|^2 = \int x(t)x^*(t)dt = \int |x(t)|^2 dt$, и он конечен – так называемые *функции с суммируемым квадратом*. Данное пространство также имеет свое обозначение: L_2. Вот и ответ на вопрос – пространство каких именно функций рассматривается.

Но велик ли запас подобных функций?

Если функции интегрируются на конечном отрезке $a \le t \le b$, вряд ли предвидятся проблемы. Подходит достаточно много функций, во всяком случае – все непрерывные. Хотя и не только. Функции могут иметь разрывы, и даже быть всюду разрывными. Конечно, в последнем случае подразумевается интегрирование не обыкновенное – «по Риману», а *по Лебегу*, отсюда и символ *L*.

Если же нас интересует *несобственный* интеграл в пределах $(-\infty, \infty)$, то вполне возможна ситуация «бесконечности» и самого интеграла. Значит, в качестве $x(t)$ устроят лишь функции, достаточно быстро спадающие к нулю в обе стороны – в плюс и в минус бесконечность. В принципе, достаточно спадания в интегральном смысле, но в приложениях обычно подразумевается тривиальное падение по абсолютной величине. К примеру, различного рода физические поля принимают нулевыми на бесконечности.

Задача 1. Определить метрику в гильбертовом функциональном пространстве.

Для нормированных пространств метрика – норма разности. Квадрат этой нормы равен:

$\|x(t) - y(t)\|^2 = \int |x(t) - y(t)|^2 dt$, отсюда:

$$\rho(x, y) = \sqrt{\int |x(t) - y(t)|^2 dt} .$$

Знак модуля появляется из-за того, что функция $x(t) - y(t)$ может быть комплексной! И если так, то можно дать следующий вариант записи:

$$\rho(x, y) = \sqrt{\int [x(t) - y(t)] \cdot [x(t) - y(t)]^* dt}$$

Задача 2. Дано пространство L_2 функций $x(t)$ на отрезке $[-L/2, L/2]$. Убедиться, что его подмножество, удовлетворяющее условию: $x(-L/2) = x(L/2) = 0$, тоже является гильбертовым пространством.

Просто проверить, что указанное данное подмножество является линейным подпространством.

Функциональный ряд Фурье

Базис $\varphi_k(t)$ придется строить теперь тоже из функций. Он должен быть нормированным и ортогональным. То есть, выражая через символ Кронекера: $\int \varphi_j(t)\varphi_k^*(t)dt = \delta_{jk}$.

Базисные векторы обозначаем как φ (а не e): так уж принято, и, главное, не будет путаницы с числом Эйлера. Полнота базиса проверяется равенством Парсеваля:

$\|x\|^2 = \sum_k |\langle \varphi_k, x\rangle|^2$, то есть: $\int |x(t)|^2 dt = \sum_k \left| \int \varphi_k^*(t)x(t)dt \right|^2$.

Если выбран базис, то справедливы формулы, указанные в таблице 1. Их можно уточнить, раскрыв скалярное произведение – см. таблицу 2.

Таблица 2

1	$x_k = \int x(t)\varphi_k^*(t)dt$	k-й коэффициент Фурье равен скалярному произведению вектора с k-м ортом
2	$x_k\varphi_k(t) = \varphi_k(t)\int x(t)\varphi_k^*(t)dt$	Проекция вектора на орт равна произведению орта на коэффициент Фурье
3	$x(t) = \sum_k \varphi_k(t)\int x(t)\varphi_k^*(t)dt$	Вектор равен сумме всех своих проекций

Формула 1 переводит векторы в новое представление: функции $x(t)$ превращаются в бесконечные последовательности x_k. Как и положено, любая j-я функция базиса в представлении данного базиса явит собой последовательность из всех нулей и единицы на j-м месте. Только последовательности теперь бесконечные…

В итоге имеем отображение $L_2 \to l_2$. Разумеется, отображения континуального пространства на счетное не может быть без потерь.

Дельта-функция

Возьмем формулу 3 таблицы 2. Ради общности, будем различать обозначения: переменной интегрирования t – и аргумента левой части τ. Что логично, ведь, как известно, переменная интегрирования может быть любой, после интегрирования она пропадает.

$$x(\tau) = \sum_k \varphi_k(\tau)\int x(t)\varphi_k^*(t)dt.$$

Поскольку интегрирование линейно, формально суммировать можно под знаком интеграла:

$$x(\tau) = \int x(t)\left[\sum_k \varphi_k^*(t)\varphi_k(\tau)\right]dt. \qquad (5.5)$$

«Формально» – потому что сумма $\sum_k \varphi_k^*(t)\varphi_k(\tau)$, появившись внутри интеграла, теряет смысл, соответствуя, скорее всего, расходящемуся ряду. Тем не менее, удобно считать, что некий смысл у нее имеется.

$$\delta(t-\tau) = \sum_k \varphi_k^*(t)\varphi_k(\tau) \qquad (5.6)$$

– называют *дельта-функцией Дирака*. Ей предстоит играть немалую роль в наших штудиях. Напомним, что φ_k это любой ортонормированный базис в пространстве функций.

Из (5.5) и (5.6) выходит:

$$x(\tau) = \int x(t)\delta(t-\tau)dt\,. \qquad (5.5а)$$

Собственно, (5.5а) можно принять за альтернативное определение δ-функции.

В частности, при $\tau = 0$: $x(0) = \int x(t)\delta(t)dt$. Формула, известная по вузовскому курсу. Из нее немедленно следует, что $\int\limits_{-\infty}^{\infty}\delta dt = 1$.

Что и говорить, $\delta(t)$ – функция весьма странная: равна нулю везде, кроме нуля, а при $t = 0$ не существует. Иногда говорят, что $\delta(0)$ равно бесконечности, что, разумеется, некорректно, но некоторый смысл тут все-таки можно усмотреть, и он будет расшифрован в дальнейшем.

Равенство почти всюду

Формула (5.4) для скалярного произведения задает норму функции $x(t)$:

$$\|x(t)\| = \sqrt{\langle x(t),\, x(t)\rangle} = \sqrt{\int |x(t)|^2 dt}\,.$$

Мы выразили также и метрику («расстояние» между функциями).

Пространство с такой нормой и соответствующей метрикой обозначается L_2.

Но всплывает серьезная проблема: не выполняется первая аксиома метрики! Напомню, из $\rho(x, y) = 0$ должно следовать $x = y$, и наоборот. У нас же $x(t)$ и $y(t)$ могут не совпадать, и, тем не менее, $\int |x(t) - y(t)|^2 dt$ быть равным нулю. Иными словами, норма функции, не равной тождественно нулю, может быть все-таки нулевой, что противоречит требованиям к норме.

Сюжет, когда-то рассмотренный, но мы повторимся. В самом деле, пусть $x(t)$ и $y(t)$ равны всюду, кроме единственной точки t_0 (в которой различаются). Понятно, что это не повлияет на нулевое значение интеграла. То же самое будет, если различие функций имеется в двух точках. И на любом конечном множестве точек. И даже на бесконечном (но счетном)! Наша метрика в действительности является *полуметрикой*, помните?

Итак, существуют функции, не совпадающие, но «расстояние» между которыми нулевое. Они различаются на множестве точек аргумента *t*, имеющих *меру нуль*. Или иначе: функции совпадают *почти всюду*, они *эквивалентны*.

Чтобы формально не нарушались аксиомы, такие эквивалентные функции принимают как бы за одну функцию – за один и тот же вектор. Эквивалентные векторы объединяются в *классы эквивалентности*. Значит, L_2 не пространство функций, а пространство классов эквивалентности, или *фактор-пространство*. В противном случае просто отсутствовала бы норма.

Проблема рядов Фурье

Придумать подходящее слово – еще не значит решить проблему. Которая состоит в том, что коэффициенты Фурье $x_k = \int x(t)\varphi_k^*(t)dt$, как оказывается, не являются однозначным представлением функции $x(t)$! Заменим функцию $x(t)$ на $\tilde{x}(t)$, совпадающую с ней почти всюду. Мы, очевидно, получим те же значения коэффициентов x_k: интегралы-то не изменятся. Отображение $x(t) \to \{x_k\}$ неинъективно, да и не может быть таковым, как уже было замечено!

Отсюда неоднозначность ряда Фурье $\sum_k x_k \varphi_k(t)$: мы точно не уверены, какой результат получим. Вполне вероятно, он будет отличаться от $x(t)$, использованного для нахождения коэффициентов. Из функции $x(t)$ получили коэффициенты Фурье x_k … но полученный ряд Фурье сходится к другой функции – $\tilde{x}(t)$!

Разность $x(t) - \tilde{x}(t)$ является необычной функцией: она вроде бы ненулевая, но, тем не менее, ортогональна ко всем базисным. Утверждая, что базис φ_k в пространстве функций «полон», нельзя обойтись без кавычек.

И все потому, что $x(t)$ и $\tilde{x}(t)$ *почти всюду* совпадают. Говоря техническим языком, энергия разностного сигнала $\|x(t) - \tilde{x}(t)\|^2$ равна нулю. Впрочем – продолжая технический сюжет – если разложение по базисным функциям выполнено неидеально (а что в мире идеально?), в восстановленном сигнале вылезут заметные артефакты.

Можно, конечно, сузить пространство функций: так, чтобы оно являлось *линейной оболочкой* системы базисных функций. Говорят о *пространстве, натянутом на счетный базис*.

Такое пространство тоже гильбертово. Базис в нем полный без кавычек: не содержит ненулевых функций, ортогональных ко всем базисным. Но данное пространство будет весьма узким, так что придется все же смириться с «проблемами». Чему помогает тот факт, что линейная оболочка системы базисных функций – хотя и не совпадает с пространством L_2, тем не менее *всюду плотна* в нем. По данной причине вопросов с равенством Парсеваля не наблюдается.

Частотное представление

Продолжаем тему рядов Фурье. На практике охотно используют базис из функций:

$\varphi_k(t) = e^{ikt}$ – на отрезке $t = [-\pi, \pi]$ (i это «мнимая единица»!)

Проверим ортонормальность:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \varphi_j(t)\varphi_k^*(t)dt = \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(j-k)t}dt.$$

Вспомним, что $e^{i\alpha} = \cos\alpha + i\sin\alpha$. Интеграл в симметричных пределах от синуса равен нулю, и остается:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(nt)dt \text{ (где } n = j - k \neq 0).$$

Ясно, что интеграл косинуса на периоде – ноль. Ортогональность соблюдается.

Вторая проверка ($j = k$):

$$\int_{-\pi}^{\pi} \varphi_k(t)\varphi_k^*(t)dt = \int_{-\pi}^{\pi} e^0 dt = \int_{-\pi}^{\pi} dt = 2\pi.$$

А должна быть единица, следовательно, вносим уточнение: ортонормированными базисными функциями должны являться: $\varphi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikt}$.

С данным базисом формула для коэффициентов Фурье (№ 1 в табл. 2) будет выглядеть так:

$$x_k = \int_{-\pi}^{\pi} x(t)\varphi_k^*(t)dt = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} x(t)e^{-ikt}dt .$$

Собственно ряд:

$$x(t) = \sum_k x_k \varphi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k x_k e^{ikt} .$$

Если t – время, то в показателе степени получается размерная величина, чего не должно быть. Будем считать, что в формулах выше фигурирует безразмерное время t', связанное с «настоящим» временем t следующим образом:

$$t' = 2\pi \frac{t}{T} .$$

Имея это в виду, базис записывают иначе, через «размерное время»:

$\varphi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{2\pi ikt/T}$, где k безразмерно.

Или: $\varphi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\Omega t} \quad \left(\Omega = \frac{2\pi}{T}\right)$. (5.7)

Функции рассматриваются на отрезке $[-T/2, T/2]$.

Теперь формула для коэффициентов Фурье:

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} x(t')e^{-ikt'}dt' = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)e^{2\pi ikt/T} d\left(2\pi \frac{t}{T}\right) = \frac{\sqrt{2\pi}}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)e^{2\pi ikt/T}dt =$$

$$= \frac{\sqrt{2\pi}}{T} \int_{-T/2}^{T/2} x(t)e^{ik\Omega t}dt .$$

Разложение функции в подобный ряд называют *частотным представлением*.

Именно такую версию и преподают в вузах в качестве классического «ряда Фурье». Вдобавок, не слишком-то понятную экспоненту норовят разложить на синус и косинус. Вдобавок перепихивают туда-сюда постоянные коэффициенты – меняют «нормировку». Все это отражено в стандартных учебниках, и нам здесь малоинтересно.

Кстати отметим, что все наши базисные функции $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\Omega t}$ на краях отрезка (в точках $-T/2, T/2$) имеют равные значения. Следовательно, и функция, представленная рядом из базисных – тоже. Любая же функция, для которой $x(-T/2) \neq x(T/2)$, явно не относится к «пространству, натянутому на базисные функции». И с ней возникнет та самая проблема рядов Фурье.

6. Интегральные преобразования

Сюжет с рядом Фурье – побочный, и отвлекаться на него больше не будем. Размерность пространства функций в общем случае (как мы уже упоминали) не счетная, а континуальная. При континуальной размерности базис, по-настоящему, должен быть несчетным… Осталось придать этому утверждению внятный смысл.

Континуальное представление

Вектор равен сумме своих проекций, и если понятие суммы еще можно распространить на счетное множество слагаемых (сумма бесконечного ряда), то суммирование континуального множества ставит в тупик.

Тем не менее, можно попытаться построить теорию формально по аналогии с рядами Фурье, только вместо сумм приладить интегралы. И посмотреть, выйдет ли нечто непротиворечивое и полезное. Не открою секрета, сказав заранее, что – да, выйдет!

Для начала, множество базисных функций $\varphi_\lambda(t)$ будет континуумом: на место целого индекса k встал непрерывный параметр λ. Таким образом, $\varphi_\lambda(t) = \varphi(t, \lambda)$ является фактически функцией двух переменных (семейство функций аргумента t, различающихся параметром λ).

Теперь и «коэффициенты Фурье» x_k (формула 1 таблицы 2) сливаются в функцию параметра λ:

$$x_\lambda = \langle x(t), \varphi_\lambda(t) \rangle = \int x(t)\varphi_\lambda^*(t)dt\,. \qquad (6.1)$$

Интегралы далее всюду, где особо не оговорено, будем подразумевать в бесконечных пределах.

Говорят, что x_λ – функция $x(t)$ в λ-представлении. Попросту можно записать так:

$$x(\lambda) = \int x(t)\varphi^*(t, \lambda)dt\,. \qquad (6.2)$$

Подчеркнем: $\varphi(t, \lambda)$ есть базис λ-представления, но во временном представлении. Вспомните: новые базисные векторы, выраженные в старом базисе.

Кстати, выражения наподобие (6.2), а они будут встречаться нередко, называются *интегральными преобразованиями*. Член типа $\varphi^*(t, \lambda)$ называют *ядром*. Его параметр λ при интегрировании играет роль константы.

В сущности, (6.2) – линейный оператор $\hat{A}x$, преобразующий вектор $x(t)$ к другим координатам (представлению). Только вместо матрицы имеем ядро. Иначе говоря, для каждого значения λ данный интеграл это функционал: вектору $x(t)$ он сопоставляет число $x(\lambda)$. А всевозможные функционалы (для любых λ) в совокупности образуют линейное пространство, называемое… все правильно: *сопряженным* к пространству функций аргумента t.

В связи с тем, что разложение по континуальному базису введено несколько условно, надо быть готовым к тому, что базисные функции окажутся не вполне обычными.

Слабая сходимость

Определим базис, в котором коэффициенты разложения $x(\lambda)$ – и есть сами значения x. Преобразование, не меняющее функции; как бы единичный оператор:

$$x(\tau) = \int x(t)\varphi^*(t, \tau)dt \qquad (6.3)$$

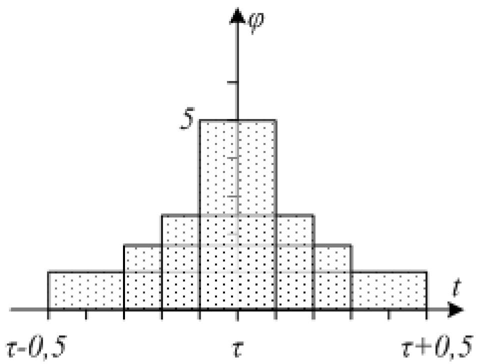
Обозначение τ (некое «альтернативное время») введено, чтобы отличать от переменной интегрирования t. Вспомним, что оператор всегда меняет индексацию: $t \to \tau$, неважно, что здесь она континуальная. А под интегралом τ рассматривается в качестве константы.

В общем-то, не существует ядра в виде какой-то «обычной» функции $\varphi(t, \tau)$, такой, чтобы выполнялось (6.3). Хотя по (5.6) мы догадываемся, что такое эта $\varphi(t, \tau)$ …

Возьмем $\varphi(t, \tau)$ в виде короткого «импульса» (единичной площади) вокруг значения τ. Функция вещественная, так что комплексное сопряжение игнорируем. Тогда $x(t)$ можно считать примерно постоянным на импульсе, и равным $x(\tau)$. И (6.3) будет приблизительно выполняться – тем точнее, чем меньше ширина импульса T.

Рисунок изображает такой прямоугольник высотой $1/T$ с серединой в точке τ, такой, что площадь его $\int \varphi dt$ равна 1 при любом T.

При $T \to 0$ прямоугольник $\varphi(t, \tau)$ сжимается в ширину и бесконечно вытягивается вверх. Хочется думать, что последовательность функций φ_k стремится к некоему пределу – он-то и нужен… Увы, никакого предела (по принятой норме) тут нет, функции не образуют даже фундаментальной последовательности: норма (площадь) у всех попросту одна и та же. И никакой другой подходящей нормы не ввести. Но можно взять некоторый заменитель нормы.



Прямоугольник единичной площади при сужении неограниченно вытягивается вверх

Как уже замечено, предел имеет функционал $\int x(t)\varphi^*(t, \tau)dt$ – если $x(t)$ достаточно гладкая. Сужая прямоугольник, мы стремим значение интеграла к величине $\int x(t)\varphi dt = x(\tau)\int \varphi dt = x(\tau)$ (ведь $\int \varphi dt = 1$ по условию).

Последовательность сужающихся функций φ_k не фундаментальна, зато таковой является последовательность их функционалов. Она имеет предел, так как числовое множество полно. В таких случаях говорят, что φ_k имеет *слабый предел*. И в пределе $\int x(t)\varphi dt = x(\tau)$. Этот «слабый» предел для φ_k назван *дельта-функцией Дирака*.

Заметим, что *слабая сходимость* по определению предполагает сходимость любых функционалов, в данном случае – при любом $x(t)$.

Итак, последовательность неограниченно сужающихся (и бесконечно вытягивающихся вверх) прямоугольников, имеющих единичную площадь, *слабо сходится* к δ-функции: $\varphi_k \xrightarrow{w} \delta(t)$. Сходимость самих векторов по их метрике подменяется сходимостью функционалов. Идея позволяет конструировать новые объекты там, где обычной (сильной) сходимости вроде бы нет. Вот и здесь построили некоторое подобие функции –

дельта-функцию. И, как было обещано, разъяснили, в каком смысле она «бесконечна» при $t = \tau$.

«Подобие» – потому что δ-функция не является функцией в привычном понимании (так называемой *регулярной*).

Кстати, вместо прямоугольников мы могли бы взять разные другие функции «импульсного» характера, к примеру, функции Гаусса.

Функция $\delta(t, \tau) = \delta(t - \tau)$ является аналогом символа Кронекера δ_{jk} (единичного оператора для конечномерного случая): вместо $x_k = \sum \delta_{jk} x_j$ теперь $x(\tau) = \int \delta(t, \tau) x(t) dt$. Как и там, вектор не изменяется, а только «переиндексируется».

Задача. Найти слабый предел последовательности базисных векторов e_k гильбертова пространства. (Вопрос несколько озадачивает, ведь сама по себе последовательность e_k и не думает никуда не сходиться…)

> Вспомним равенство Парсеваля: $\|x\|^2 = \sum_k \left|\left\langle e_k, x \right\rangle\right|^2$. Чтобы ряд сходился, необходима сходимость к нулю $\left|\left\langle e_k, x \right\rangle\right|^2$, а значит, и $\left\langle e_k, x \right\rangle$. Но последнее выражение – функционал от e_k.
>
> Итак, имеем $\left\langle e_k, x \right\rangle \to 0$ при любом *x*, и можно говорить о слабой сходимости, вот только к чему? Очевидно, что $\left\langle e_k, x \right\rangle$ равняется нулю при любом *x* только если $e = 0$, вот и ответ: последовательность базисных векторов e_k слабо сходится к нулевому вектору, $e_k \xrightarrow{w} 0$.
>
> Иными словами, коэффициенты Фурье с ростом их номера обязаны становиться все меньше. А чего другого мы ожидали?

Временное представление

Итак, функции $\varphi(t, \tau) = \delta(t - \tau)$ образуют континуальный ортонормированный базис исходного представления. Каждая точка $x(t)$ является в то же время «координатой». А просуммировав (проинтегрировав!) базисные функции $\delta(t - \tau)$ с «коэффициентами» $x(\tau)$, мы должны получить исходный вектор $x(t)$:

$\int_{-\infty}^{\infty} x(\tau)\delta(t - \tau) d\tau = x(t)$. Именно так и получается.

Если считать, что *t* это время, такое представление можно назвать *временным*. Записывая: $x(t)$, имеем представление в базисе дельта-функций от времени.

Базису полагается быть ортонормированным. Проверим:

$\left\langle \delta_\tau, \delta_\mu \right\rangle = \int \delta(t - \tau)\delta(t - \mu) dt$.

Обозначив $x(t) = \delta(t - \mu)$, по свойству дельта-функции получаем:

$\left\langle \delta_\tau, \delta_\mu \right\rangle = \int x(t)\delta(t - \tau) dt = x(\tau) = \delta(\tau - \mu)$.

Ортонормальность соблюдается, но своеобразно: δ – уже не символ Кронекера, а дельта-функция.

Поэкспериментируем с аналогом равенства Парсеваля, где вместо суммы будет теперь интеграл:

$$\int \left|\left\langle x(t), \varphi(t, \lambda) \right\rangle\right|^2 d\lambda = \int \left| \int x(t)\delta(t - \tau) dt \right|^2 d\tau = \int |x(\tau)|^2 d\tau .$$

Но справа и есть квадрат нормы $\|x(t)\|^2$, ведь переменная интегрирования не играет роли. Все сошлось: подтверждена полнота базиса.

Частотное представление

Собственно говоря, формула:

$$\int \delta(t-\tau)\delta(t-\mu)dt = \delta(\tau-\mu)$$

– является аналогом определения δ-функции (5.6):

$$\delta(t-\tau) = \sum_k \varphi_k^*(t)\varphi_k(\tau).$$

Достаточно сделать замену: $t \to t-\tau$, $\tau \to t-\mu$, а вместо суммы по индексу k – интеграл по «континуальному индексу» λ:

$$\delta(t-\tau) = \int \varphi_\lambda^*(t)\varphi_\lambda(\tau)d\lambda.$$

φ_λ это любая система ортонормированных функций.

В качестве базисных функций можно взять и знакомые (5.7):

$$\varphi_k(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{ik\Omega t},$$

но теперь вместо дискретного индекса $k\Omega$ берем континуальный ω:

$$\varphi_\omega(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\omega t},$$

и тогда:

$$\delta(t-\tau) = \int \varphi_\omega^*(t)\varphi_\omega(\tau)d\omega = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}e^{i\omega\tau}d\omega = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-\tau)}d\omega. \qquad (6.4)$$

Формула, между прочим, небесполезная, и весьма пригодится! Но снова надо помнить, что она условная, «символическая»: попытка напрямую вычислить интеграл ни к чему не приведет.

Подставляя в (6.1), запишем функцию в частотном представлении:

$$x(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} x(t)e^{-i\omega t}dt. \qquad (6.5)$$

Данное интегральное преобразование называют *преобразованием Фурье*. Нам еще предстоит убедиться, насколько оно эффективно при решении дифференциальных уравнений.

В ходу и такая терминология: $x(\omega)$ – *фурье-образ*, $x(t)$ – *оригинал*.

Естественно, можно перейти назад к временному представлению, суммируя базисные функции $\varphi_\omega(t)$ с коэффициентами $x(\omega)$ … точнее, интегрируя:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x(\omega)e^{i\omega t}d\omega. \qquad (6.6)$$

Задача 1. Найти преобразование Фурье от производной: $x'(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \frac{dx(t)}{dt}e^{-i\omega t}dt$.

Для начала сокращаем dt и получаем $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-i\omega t}dx$. Как быть дальше?

Подсказка: в подобных случаях выручает формула «интегрирования по частям». Вот она, если кто-то забыл:

$$\int_a^b u dv = uv\Big|_a^b - \int_a^b v du .$$

Примем, что $u = e^{-i\omega t}$, $v = x$, $dv = dx$.

Нам еще потребуется du, и очевидно, что $du = -i\omega e^{-i\omega t} dt$.

Осталось записать $uv\Big|_a^b - \int_a^b v du$ … Но сейчас будет фокус. Вспомните, что мы рассматриваем множество функций $x(t)$, непременно обращающихся на бесконечностях в ноль. Так как $v = x$, слагаемое $uv\Big|_{-\infty}^{\infty}$ обнуляется, и остается:

$$x'(\omega) = \frac{i\omega}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-i\omega t} dt = i\omega x(\omega) .$$

Дифференцирование оригинала по времени соответствует умножению образа на $i\omega$.

Нетрудно доказать, что в случае второй производной фурье-образ умножается на $(i\omega)^2 = -\omega^2$, и так далее.

Задача 2. Найти фурье-образ константы (для простоты единицы): $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int e^{-i\omega t} dt$.

Строго говоря, вопрос некорректный: $x(t) = 1$ не отвечает требованиям, чтобы функции на бесконечностях спадали до нуля. Но закроем на это глаза, допустим, что где-то далеко-далеко именно так и будет.

Возьмем «небесполезную» формулу (6.4):

$$\delta(t-\tau) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega(t-\tau)} d\omega ,$$

в которой примем $\tau = 0$:

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} d\omega .$$

Поменяем в ней t и ω (какая разница, как что обозначать?):

$$\delta(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} dt , \ \sqrt{2\pi}\delta(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} 1 \cdot e^{i\omega t} dt .$$

Как видим, левая часть и дает ответ.

Задача 3. Найти преобразование Фурье от экспоненты $x(t) = e^{i\Omega t}$.

Подсказка: использовать результат предыдущей задачи. Ответ: $\sqrt{2\pi}\delta(\omega - \Omega)$.

Необходимое оправдание

Внимательный читатель заметит некорректности на каждом шагу. Формулу $x(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{-i\omega t} dt$ интерпретировали как представление произвольной функции $x(t)$

в базисе функций $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\omega t}$. Но здесь явное жульничество: «базисные» функции не принадлежат L_2! В самом деле, норма функции (точнее, квадрат):

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i\omega t}\right)\cdot\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{i\omega t}\right)dt=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}dt$$

– не существует, интеграл расходится.

Чего уж там, и $\delta(t)$ не принадлежит L_2!

Тем не менее, преобразование Фурье настолько важно, что забудем про игры в «базис»: достаточно, чтобы преобразование сходилось. Такое вполне возможно, если сама $x(t)$ спадает до нуля на бесконечностях.

Интеграл $\int_{-\infty}^{\infty}xe^{-i\omega t}dt$ бесспорно сходится, если сходится интеграл модуля:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|xe^{-i\omega t}\right|dt=\int_{-\infty}^{\infty}|x|\cdot\left|e^{-i\omega t}\right|dt=\int_{-\infty}^{\infty}|x|dt. \qquad (6.7)$$

Результат (6.7), кстати, отвечает всем свойствам нормы – можно проверить. Пространство функций с нормой $\|x(t)\|=\int_{-\infty}^{\infty}|x(t)|dt$ обозначается L_1, да мы с ним и знакомы. Правда, такая норма не может быть получена ни из какого скалярного произведения; пространство L_1 *не гильбертово*.

Зато для функций из L_1 преобразование Фурье точно существует!

Но многие функции из L_1 принадлежат и L_2 тоже! Посему можно распространить преобразование на все L_2, с учетом того, что ведь и для $x(t)$ из L_2 равенство Парсеваля выполняется.

Слабая полнота

Рассматривая проблему под другим углом зрения, находим ее в следующем: пространство L_2 функций на $(-\infty,\infty)$ полно, как всякое гильбертово: любая фундаментальная последовательность $x_k(t)$ имеет предел в L_2. Однако оно не *слабо полно*! Докажем контрпримером, заодно разбираясь, в чем дело.

Возьмем последовательность функций:

$$x(t)=\begin{cases}e^{i\omega t}\ (-T\le t\le T)\\ 0\ (t<-T,\, t>T)\end{cases} \text{ при } T\to\infty.$$

Функции, несомненно, принадлежат L_2 – норма существует:

$$\int_{-T}^{T}e^{i\omega t}e^{-i\omega t}dt=\int_{-T}^{T}dt \text{ – конечен.}$$

Рассмотрим последовательность функционалов от $x(t)$:

$$\int_{-\infty}^{\infty}y(t)x(t)dt=\int_{-T}^{T}y(t)e^{i\omega t}dt \text{ при } T\to\infty. \qquad (6.8)$$

Поскольку $y(t) \in L_2$ в обе стороны интегрально спадает, интеграл (6.8) при $T \to \infty$ имеет предел… которому, однако, не соответствует никакая из функций $x(t)$! Точнее, ему соответствует $e^{i\omega t}$ на всей оси, но ведь $e^{i\omega t} \notin L_2$.

В L_2 слабый предел для рассматриваемых функций отсутствует!

Чтобы L_2 стало слабо полным, его надо пополнить функциями вида $e^{i\omega t}$. Что даст законное обоснование нашим операциям. То же самое относится и к δ-функциям.

Обратное преобразование Фурье

Выражения (6.5) и (6.6) кажутся парными, однако имеют совершенно разную природу. Первое – скалярное произведение $x(t)$ с индексированной базисной функцией. Второе – «сборка» функции из континуальных компонент.

Проведем формальное преобразование нашей функции от частотного представления к временному. Сделаем некоторые заготовки.

Найдем частотное представление базисной функции $\varphi_\Omega(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\Omega t}$, где Ω – некоторое частное значение параметра ω.

$$\varphi_\Omega(\omega) = \frac{1}{2\pi}\int e^{i\Omega t} e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{2\pi}\int e^{i(\Omega-\omega)t} dt .$$

Сопоставим с (6.4): полученное выражение, как оказывается, равно $\delta(\Omega-\omega)$. Или $\delta(\omega-\Omega)$ – поскольку дельта-функция четна. Но так и должно было получиться: частотное представление в частотном базисе является «стандартным».

Теперь найдем частотное представление дельта-функции:

$$\delta_\tau(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \delta(t-\tau) e^{-i\omega t} dt = \frac{e^{-i\omega\tau}}{\sqrt{2\pi}} .$$

Итак, дельта-функция и наша «*e* в степени» – одна и та же функция, но в разных представлениях!

Ну а теперь к делу: используем (6.2), только делаем замену: $t \to \omega$, $\lambda \to t$:

$$x(t) = \int x(\omega)\varphi^*(\omega, t) d\omega .$$

$\varphi(\omega, t)$ – базис временного представления (дельта-функция) в частотном представлении: $\varphi(\omega, t) = \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2\pi}}$. Окончательно, для оригинала:

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x(\omega) e^{i\omega t} d\omega .$$

Получили, конечно, уже известное выражение (6.6).

Задача. Проверить, что оригинал $\sqrt{2\pi}\delta(\omega)$ и в самом деле равен единице.

Согласно (5.6):

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \sqrt{2\pi}\delta(\omega) e^{i\omega t} d\omega = \int \delta(\omega) e^{i\omega t} d\omega = e^{i0t} = 1 .$$

Унитарные операторы

Поскольку базисы, с которыми мы имеем дело, ортонормированы, преобразования от временного представления к частотному и обратно не изменяют нормы, и (как известно) должны называться *унитарными преобразованиями*. Таким образом, операторы типа $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \ldots e^{i\lambda\mu} d\lambda$ и $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \ldots e^{-i\lambda\mu} d\lambda$ являются унитарными.

Такая запись неудобна, и оператором обычно называют ядро интегрального преобразования. Например, оператор $\frac{e^{i\lambda\mu}}{\sqrt{2\pi}}$ унитарный. Аналогично тому, как в линейной алгебре оператором считалась матрица (хотя, строго говоря, им является перемножение с матрицей).

Это короткое предисловие к вопросам, которые будут освещены гораздо подробнее в следующем разделе.

Сводка полезных формул

В таблицу 3 сведены многие формулы, которые нам довелось вывести. Они еще не раз потребуются, и держать их в одном месте удобно.

Таблица 3

Функция	**Фурье-образ**
$\delta(t-\tau)$	$\frac{e^{-i\omega\tau}}{\sqrt{2\pi}}$
$\frac{e^{i\Omega t}}{\sqrt{2\pi}}$	$\delta(\omega-\Omega)$
$\sqrt{2\pi}\delta(t)$	1
1	$\sqrt{2\pi}\delta(\omega)$
$-itx(t)$	$\frac{dx(\omega)}{d\omega}$
$\frac{dx(t)}{dt}$	$i\omega x(\omega)$

7. Линейные операторы в бесконечномерных пространствах

Логика изложения подвела нас к теме операторов. В бесконечномерных пространствах имеем некоторую аналогию матрицам. Иногда даже говорят о матрицах бесконечного размера… Конечно, в действительности ситуация иная, иногда даже принципиально иная.

Краткое содержание предыдущих серий

Припомним то, что ранее излагалось. В функциональном анализе пользуются понятием *отображения*. Если каждому x из *области определения* можно поставить в соответствие некоторое y, то говорят, что задано отображение. Которое переводит элементы множества X в элементы из Y, что обозначается $f : X \to Y$.

Множество Y называют *образом* X, а X является для Y *прообразом*.

Почему «отображение», а не функция? У нас же функциональные пространства! В обычном анализе x и y были числами, в теории операторов стали векторами… И теперь они нередко функции! Функция, переводящая одну функцию в другую функцию? Нет, пусть лучше будет «отображение».

Если X и Y векторные пространства, отображение традиционно именуют *оператором* $\hat{A}: X \to Y$. Итак, оператор есть правило, позволяющее элементу (вектору) $x \in X$ сопоставить вектор $y \in Y$.

Конечно, пространства X и Y могут иногда совпадать, быть одним и тем же, тогда отображение называют *автоморфизмом*… Что вовсе необязательно, и даже в самых ответственных случаях такого не получается!

Нас по-прежнему интересуют *линейные операторы*. Например, оператор дифференцирования линеен: производная суммы равна сумме производных, постоянный множитель выносится за знак производной. Оператор интегрирования также линеен.

Поскольку x и y – элементы разных пространств, может оказаться, что они имеют и разную физическую размерность. Соответственно, оператор будет уже размерным (а значит, и его собственные значения тоже!) К примеру, оператор дифференцирования по времени $\hat{D} = \dfrac{d}{dt}$ имеет размерность $\left[t^{-1}\right]$.

Прямой и обратный

Обратный оператор $\hat{A}^{-1}$ существует, во-первых, тогда, когда прямой оператор $\hat{A}$ отображает разные x на разные y (инъективен) – это нам известно. Возможна ситуация, когда прямой оператор не сюръективен: отображает пространство X не на все пространство Y, а лишь на его часть. Как говорят, *образ* оператора $\hat{A}$ не совпадает с Y: $\mathrm{Im}(\hat{A}) \neq Y$. Появляются «незадействованные» y, которым не соответствуют никакие x, и с обратным оператором опять проблема.

Если X и Y разные пространства, то кажется, что $\mathrm{Im}(\hat{A})$ попросту есть пространство Y, тогда и говорить не о чем. Но дело в том, что образ $\hat{A}$ может не являться линейным пространством. И тогда он подмножество некоторого линейного пространства Y. В n-мерном пространстве такого не бывает, а вот в бесконечномерном – вполне.

Кстати, если отображение инъективно и сюръективно, его называют *биекцией*, или взаимно-однозначным соответствием (вещь знакомая). По-другому это называют *изоморфизмом*.

В бесконечномерных пространствах нахождение обратного оператора всякий раз является нетривиальной задачей. Будет поучительно рассмотреть некоторые примеры.

Пусть X – линейное пространство непрерывно дифференцируемых функций $x(t)$ на интервале $0 \le t \le 1$, оно обозначается $C^1[0,1]$ (единичка сверху намекает на однократное дифференцирование). Y – пространство непрерывных функций $C[0,1]$. Оператор дифференцирования $\hat{D} = \frac{d}{dt}$ получает следующее описание: $\hat{D}: C^1[0,1] \to C[0,1]$ (первое пространство отображается на второе, дифференцирование переводит функции с непрерывной производной – в просто непрерывные). Заметьте, что оно не есть автоморфизм!

Разберемся, имеет ли оператор $\hat{D}$ обратный.

Функции, отличающиеся на константу, имеют одну и ту же производную. Зная производную, мы не можем ведь указать исходную функцию однозначно.

Значит, оператор дифференцирования не инъективен: разные $x(t)$ он переводит в одинаковые $\frac{dx}{dt}$.

То есть, обратный ему оператор не существует? Можно возразить: по сути дела, обратный оператор имеется, это неопределенный интеграл… Рассмотрим вопрос детальнее, записав два варианта.

Первый: $x = \hat{D}^{-1}\hat{D}x = \int \frac{dx}{dt}dt + C = x + C$. Обратный оператор $\hat{D}^{-1}$ стоит *слева*, то есть, применили сначала дифференцирование, затем интегрирование. Как видим, применение последовательно прямого и обратного операторов приводит к неоднозначности. Говорят, что у $\hat{D}$ отсутствует левый обратный.

Второй: $y = \hat{D}\hat{D}^{-1}y = \frac{d}{dt}\left(\int y dt + C\right) = y$. Обратный оператор $\hat{D}^{-1}$ стоит *справа*, сперва интегрируем, потом дифференцируем. Применение последовательно обратного и прямого операторов ни к какой неоднозначности не приводит!

Таким образом, $\hat{D} = \frac{d}{dt}$ имеет *правый обратный*, но не имеет *левого обратного*.

Задача 1. Пусть X – такое подпространство пространства $C^1[0,1]$ (см. выше), что в него входят только функции, обладающие свойством $x(-\infty) = 0$. Существует ли обратный оператор к $\hat{D} = \frac{d}{dt}$?

Безоговорочно существует: из множества первообразных, имеющих данную производную, новое условие определило одну-единственную. Обратный оператор можно записать так: $\int\limits_{-\infty}^{t} ...dt$.

Задача 2. В гильбертовом пространстве l_2 бесконечных числовых последовательностей $x = (x_1, x_2, x_3, ...)$ введем оператор сдвига вправо (с заполнением свободной позиции нулем):

$$\hat{A}(x_1, x_2, x_3, ...) = (0, x_1, x_2, x_3, ...).$$

То, что оператор линейный, очевидно. А если нет, проверьте обязательно!

Вопрос будет тот же самый: имеет ли $\hat{A}$ обратный?

Кажется, почему бы нет? Сдвигаем влево, затирая ноль, вот и все… Однако мы должны произвести две проверки.

Первая: $x = \hat{A}^{-1}\hat{A}x$. Сдвинули вправо, потом сдвинули влево. Получили исходное *x*? Да. Значит, левый обратный существует.

Вторая: $y = \hat{A}\hat{A}^{-1}y$. Сдвинули влево, потом сдвинули вправо… Позвольте, но x_1 при первом сдвиге пропадет! И при сдвиге назад нечем заполнить первую позицию.

Скрытая причина в следующем: оператор $\hat{A}$ не сюръективен. Существуют такие *y*, которые не могли бы получиться сдвигом никакого *x*. А именно, последовательности, имеющие $x_1 \neq 0$.

Вывод: оператор $\hat{A}$ имеет левый обратный, и не имеет правого обратного.

Однако заметим, что множество последовательностей с $x_1 = 0$ является тоже линейным пространством! И можем рассматривать отображение пространства l_2 не как автоморфизм, то есть, не на себя (как мы молча приняли вначале), а на подпространство только тех последовательностей, у которых $x_1 = 0$. Тогда обратный оператор существует безоговорочно.

Задача 3. Найти оператор $\hat{A}^{+}$, эрмитово сопряженный к оператору сдвига вправо $\hat{A}$ из предыдущей задачи.

Вспоминаем определение:

$$\left\langle x,\, \hat{A}y \right\rangle = \left\langle \hat{A}^{+}x,\, y \right\rangle.$$

Составим левую часть равенства, учитывая, что $\hat{A}(y_1, y_2, y_3, ...) = (0, y_1, y_2, ...)$:

$$\left\langle x,\, \hat{A}y \right\rangle = x_1 \cdot 0 + x_2 y_1 + x_3 y_2 + ... = x_2 y_1 + x_3 y_2 + ...$$

Но $(x_2, x_3, ...)$ не что иное как результат сдвига *x* влево.

Так как должно быть:

$$x_2 y_1 + x_3 y_2 + ... = \left\langle \hat{A}^{+}x,\, y \right\rangle,$$

то $\hat{A}^{+}(x_1, x_2, x_3, ...) = (x_2, x_3, x_4, ...)$, $\hat{A}^{+}$ является оператором сдвига влево. В некотором смысле, $\hat{A}^{+} = \hat{A}^{-1}$. «В некотором» – поскольку с обратным оператором к $\hat{A}$ все не так просто, в чем убедились еще раньше.

Разбираемся со спектрами

В бесконечномерных пространствах дела со спектрами тоже обстоят непросто. Здесь оператор, кроме точечного спектра, может иметь еще и непрерывный!

Впрочем, освежим в памяти идеи спектральной теории. Имеется линейный оператор $\hat{A}$, интересуемся существованием таких векторов $x \neq 0$, что $\hat{A}x = \lambda x$ (λ – число, действительное или комплексное). Иначе говоря, надо решить основное уравнение спектральной теории:

$$(\hat{A} - \lambda)x = 0.$$

Действием обратного оператора $(\hat{A} - \lambda)^{-1}$ (резольвенты $\hat{A}$) оно превращается в:

$$x = (\hat{A} - \lambda)^{-1}(0).$$

Ноль преобразуется линейным оператором всегда в ноль (каковой нас не интересует), отсюда вывод: возможные решения для *x* могут соответствовать только таким значениям λ, при которых оператор $(\hat{A}-\lambda)^{-1}$ не существует. Заметьте, условие необходимое, а не достаточное!

Задача нахождения векторов *x* перешла в задачу нахождения чисел λ, она-то и выходит на первый план. Все λ, при которых резольвента не существует, образуют *спектр* оператора.

Значения λ, для которых $\hat{A}x=\lambda x$, называются собственными, и образуют точечную составляющую спектра; так было в конечномерных пространствах. Тут существуют и собственные векторы (собственные подпространства).

Однако теперь некоторые значения λ, входящие в спектр, могут не иметь соответствующих собственных векторов (непрерывная часть спектра). Их уже не называют собственными значениями.

Лучше проиллюстрировать сказанное примером, и возьмем знакомый оператор сдвига вправо в пространстве l_2:

$$\hat{A}(x_1, x_2, x_3, ...) = (0, x_1, x_2, x_3, ...).$$

Для этого оператора определим спектр.

Запишем основное уравнение спектральной теории:

$$\lambda(x_1, x_2, x_3, ...) = (0, x_1, x_2, x_3, ...).$$

Очевидно: оно выполняется только при $\lambda=0$, и причем только тогда, когда $(x_1, x_2, x_3, ...) = (0, 0, 0, ...)$. Но $x=0$ не интересует, так что делаем вывод: оператор не имеет точечного спектра. Не имеет собственных значений и собственных векторов.

Отсюда не следует, что спектр вообще пуст! Образуем оператор $(\hat{A}-\lambda)$. Действие его превратит вектор $(x_1, x_2, x_3, ...)$ в следующий:

$$y = (y_1, y_2, y_3, ...) = (-\lambda x_1, x_1-\lambda x_2, x_2-\lambda x_3, ...)$$ – проверьте!

Интересует обратный оператор (резольвента). Просто выразим, наоборот, компоненты *x* через *y*:

$$x_1 = -\frac{y_1}{\lambda};$$

$$x_2 = \frac{x_1-y_2}{\lambda} = -\frac{y_1}{\lambda^2}-\frac{y_2}{\lambda};$$

$$x_3 = \frac{x_2-y_3}{\lambda} = -\frac{y_1}{\lambda^3}-\frac{y_2}{\lambda^2}-\frac{y_3}{\lambda};$$

– и так далее.

Резольвента вроде бы налицо: любому *y* соответствует некоторый *x*… но лишь при условии, что $\lambda \neq 0$, это во-первых. Есть и вторая оговорка: при $|\lambda| \le 1$ компоненты вектора $(x_1, x_2, x_3, ...)$ нарастают по модулю с ростом номера… Получается бесконечная норма (ряд расходится), *x* не принадлежит пространству l_2.

К итогам задачи: дискретный спектр у оператора отсутствует, а непрерывный представляет собой круг комплексной плоскости с единичным радиусом.

Ассортимент функциональных пространств

В перспективе мы обращены к функциональным пространствам – векторным пространствам функций, и первостепенный вопрос: как это пространство организовано топологически. Говоря кратко: как в нем введена норма (а следовательно, и метрика). Нам уже знакомы, в большей или меньшей степени, разные варианты, которые сведем здесь вместе.

$C[a,b]$ – пространство непрерывных функций на отрезке $[a,b]$ с нормой $\|x(t)\| = \max|x(t)|$ и метрикой $\rho(x,y) = \max|x(t) - y(t)|$. Здесь $\max$ – максимальное значение функции.

Чем удобно: метрика является полноценной, то есть, невозможно, чтобы ненулевые функции имели нулевую норму.

Чем неудобно: вводится только на отрезке (строго говоря, на компактном множестве). А иначе максимум может не существовать!

L_2 – пространство функций с нормой $\|x(t)\| = \sqrt{\int x^2(t)dt}$ – таких, для которых интеграл существует. Соответственно, метрика $\rho(x, y) = \sqrt{\int [x(t) - y(t)]^2 dt}$.

Чем удобно: пространство гильбертово (существует скалярное произведение, через которое и введена норма).

Чем неудобно: норма может равняться нулю для ненулевых функций. Потому имеем пространство не функций, а классов эквивалентности. Также некоторые, самые нужные функции на $(-\infty, \infty)$ не интегрируются.

L_1 – пространство функций с нормой $\|x(t)\| = \int_{-\infty}^{\infty} |x(t)|dt$.

Чем удобно: Многие нужные функции на $(-\infty, \infty)$ интегрируются.

Чем неудобно: тоже пространство классов эквивалентности, вдобавок не гильбертово.

Возьмем задачку посложнее, перебравшись уже в функциональное пространство.

Задача. Найти спектр оператора $\hat{A}x(t) = tx(t)$, заданного на пространстве $C[0,1]$. Предварительно убедитесь, что оператор линейный!

Проверяем условие для собственных значений:

$tx(t) = \lambda x(t)$.

Очевидно, что ни при каком значении λ данная константа не может равняться переменной *t*. Точечный спектр пуст! Будем искать непрерывный.

Оператор $(\hat{A} - \lambda)$ представляет собой умножение на $(t - \lambda)$, оператор, обратный ему (резольвента) – деление на $(t - \lambda)$.

Как видно, если λ принадлежит $[0,1]$, резольвента не существует (деление на ноль, превращение непрерывной функции в разрывную). Следовательно, значения λ из $[0,1]$ представляют собой спектр.

Оператор как интегральное преобразование

Вспомним действие линейного оператора $\hat{A}$ на вектор *x* в *n*-мерном пространстве:

$$y_i = \sum_k A_{ik} x_k ,$$

что представляет собой произведение матрицы A_{ik} с вектором:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}. \qquad (7.1)$$

В краткой записи: $y = \hat{A}x$.

В функциональном пространстве имеем интегральный аналог:

$$y(\lambda) = \hat{A}x(t) = \int x(t)A(t, \lambda)dt. \qquad (7.2)$$

A – ядро оператора (*ядро Фредгольма*). Иногда его и называют собственно оператором, подобно тому, как ранее оператором считали матрицу. В действительности (как и ранее) ядро является представителем оператора в определенном базисе. В другом базисе представление примет другую форму!

Интегрирование, там, где не указано – в бесконечных пределах. Будем стараться обозначать ядро той же буквой, что и сам оператор, только без крышки.

Снова и снова отмечаем: интегральное преобразование всегда приводит к функции другой переменной. Даже если мы потом отождествим λ с t. Запомните порядок следования переменных в обозначении ядра: на первом месте аргумент исходной функции, на втором – функции, полученной действием оператора. Дальше нам придется манипулировать обозначениями, но смысл, задаваемый порядком, не меняется.

Преобразование Фурье – тоже интегральное преобразование, его ядро: $\dfrac{e^{i\lambda t}}{\sqrt{2\pi}}$.

Упоминание интеграла пугает, то ли дело привычные матрицы! На самом деле с интегралами порой даже проще, мы в этом убедимся. Для начала выразим в такой форме единичный оператор *I*, превращающий $x(t)$ в $x(\tau)$:

$$x(\tau) = \int x(t)A(t, \tau)dt.$$

Сразу видно, что здесь ядро оператора:

$$A(t, \tau) = \delta(t - \tau).$$

Что дельта-функция – аналог единичного оператора (точнее, его ядро), уже ведомо. Разберем примеры посложнее.

Задача 1. Найти ядро оператора умножения $\hat{A}x(t) = tx(t)$.

Записываем в интегральной форме:

$\tau x(\tau) = \int A(t, \tau)x(t)dt$, найти $A(t, \tau)$.

Вносим τ внутрь интеграла, ведь для него это просто константа:

$$x(\tau) = \int \frac{1}{\tau} A(t, \tau)x(t)dt.$$

Поскольку $x(\tau) = \int \delta(t - \tau)x(t)dt$, то получили:

$A(t, \tau) = \tau\delta(t - \tau)$, задача решена.

Аналогично – ядро обратного оператора $\hat{A}^{-1}x(t) = \dfrac{1}{t}x(t)$ выглядит так:

$$A^{-1}(t, \tau) = \frac{1}{\tau}\delta(t - \tau).$$

Задача 2. Получить интегральное выражение оператора дифференцирования.

Иными словами, найти ядро оператора $\hat{D} = \frac{d}{dt}$.

Снова запишем формально условие:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) D(t, \tau) dt \text{, найти } D(t, \tau).$$

Преобразуем правую часть. И здесь выручит формула интегрирования по частям:

$$\int_a^b u dv = uv\Big|_a^b - \int_a^b v du.$$

Чтобы подогнать $\int_{-\infty}^{\infty} x(t) D(t, \tau) dt$ под $\int_a^b u dv$, примем, что $dv = D(t, \tau) dt$. Ну а переменная u – это $x(t)$.

Осталось превратить его в $uv\Big|_a^b - \int_a^b v du$… Но так как $u = x$, а $x(t)$ обращается на бесконечностях в ноль, то слагаемое $uv\Big|_{-\infty}^{\infty}$ обнуляется, и остается:

$$\int_a^b u dv = -\int_{-\infty}^{\infty} v du = -\int_{-\infty}^{\infty} v dx.$$

Подставляя $dx = \frac{dx}{dt} dt$, получаем: $-\int_{-\infty}^{\infty} v \frac{dx(t)}{dt} dt$.

А теперь возвращаемся к условию задачи:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = -\int_{-\infty}^{\infty} v \frac{dx(t)}{dt} dt.$$

Ничего не замечаете? Функция $(-v)$ – не что иное как $\delta(t - \tau)$, поскольку:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(t - \tau) \frac{dx(t)}{dt} dt.$$

Теперь вспоминая, что $dv = D(t, \tau) dt$, имеем окончательно:

$$D(t, \tau) = \frac{dv}{dt} = -\frac{d\delta(t - \tau)}{dt}.$$

То есть:

$$\frac{dx(\tau)}{d\tau} = -\int_{-\infty}^{\infty} x(t) \frac{d\delta(t - \tau)}{dt} dt.$$

Задача «решена» – формально. Проверить решение на каком-то примере затруднительно: мы не знаем, что такое производная дельта-функции, и как она ведет себя под интегралом. Впрочем, все впереди…

Обобщенные функции

Куда ни кинь, кругом дельта-функция… В физических приложениях она играет крайне важную роль. Не верится, что введена она была сравнительно недавно – в 20-х годах прошлого века.

Возьмем распределение веса по длине балки (например, неоднородной). Плотность распределения описывается некоторой функцией, погонным весом как бы. Проблемы связаны с ситуациями, когда к какой-то точке балки приложена локальная нагрузка. Функция плотности распределения пасует.

В таких точках плотность «бесконечна», ее можно изобразить δ-функцией – это все помнят по вузу. Дельта-функции появляются, к примеру, в распределении случайного процесса при его прохождении через ограничитель. И во многих других ситуациях, а уж в квантовой физике особенно.

Но мы так и не разобрались до конца, что это такое. Хотя вводили $\delta(t)$ и посредством интегралов (которые расходятся), и как слабый предел последовательности некоторых функций. Дельта-функция не одинока в своем жанре: вот уже явилась ее производная, можно говорить и о высших производных…

Теория обобщенных функций началась с намерения более строго ввести понятие δ-функции. Но (как всегда в математике) академическая задача вышла далеко за первоначальные рамки. Результаты теории оказались полезными в области дифференциальных уравнений, для решения проблемы расходящихся рядов и т. п.

Вспомним: *дельта-функция Дирака* $\delta(t)$ – это не функция в аналитическом смысле, то есть, *не регулярная*. Ее нельзя представить как определенное значение функции, соответствующее каждому значению аргумента из области определения. В самом деле: $\delta(t)$ равна нулю везде, кроме нулевой точки. А в ней она равна… бесконечности? Чепуха, бесконечность – такого числа нет. К тому же мы должны тогда счесть, что существует целая шкала бесконечностей. Возьмем функцию $2\delta(t)$: в нуле снова «бесконечность», но другая, не так ли?

Однако мы твердо знаем правило:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t)\delta(t)dt = \varphi(0). \qquad (7.3)$$

Но, позвольте: это же скалярное произведение $\langle \varphi, \delta \rangle$! Функции считаем действительными, так что комплексное сопряжение игнорируем. Как известно, если второй сомножитель зафиксирован, то имеем линейный функционал: каждому вектору φ сопоставлено число $f(\varphi)$. В данном случае $f(\varphi) = \varphi(0)$.

На месте $\delta(t)$ может стоять любая функция $f(t)$, и каждой соответствует свой функционал на заданном линейном пространстве вспомогательных функций $\varphi(t)$ (которые, как ни странно, именуют *основными* функциями, впрочем, в англоязычной литературе – тестовыми):

$$f(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) f(t)dt = \langle \varphi(t),\ f(t) \rangle. \qquad (7.4)$$

Повторно предостережем от путаницы: здесь $f(t)$ это функция, то есть, вектор. А $f(\varphi)$ – число (функционал от $\varphi(t)$, скалярное произведение).

Из (7.4) не следует обратного: что любому линейному функционалу соответствует какая-то «правильная» функция $f(t)$! К примеру, наш знакомый функционал $f(\varphi) = \varphi(0)$ линеен:

$$f(\lambda\varphi) = \lambda f(\varphi) = \lambda\varphi(0),$$

$$f(\varphi + \psi) = f(\varphi) + f(\psi) = \varphi(0) + \psi(0),$$

но, как мы хорошо знаем, никакой «обычной» функции $f(t)$ в соотношение: $\varphi(0) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) f(t) dt$ подобрать не удается.

И, тем не менее, назовем любой такой функционал *обобщенной функцией*, или *распределением*, хотя бы его и нельзя было корректно представить в форме (7.4). «Функции» подобного рода, помимо привычных – вида $f(t)$ (так называемых *регулярных*), включают и весьма экзотические – *сингулярные*.

Повторим: обобщенной функцией f называется линейный функционал $\langle \varphi, f \rangle$ на множестве так называемых основных функций $\varphi(t)$. Раз не получается представить сингулярные функции привычным образом, для них придуман «заместитель».

Некоторые из обобщенных функций – обычные (регулярные) $f(t)$, тогда функционал прямо получается из (7.4) интегрированием. То есть, для таких тоже существует «заместитель» $f(\varphi)$, но он не очень-то и нужен.

Другое дело *сингулярные*, которые записать в виде (7.4) можно только условно, символически. Как уже приходилось пояснять, интегрирование – настолько мощный математический инструментарий, что даже символическая запись интеграла дает эффективные результаты.

Поскольку придется повторять фокус с интегрированием по частям, основные функции $\varphi(t)$ предполагаются спадающими к нулю в обе стороны на бесконечности. Больше того – основные функции считаются *финитными* (точно равными нулю вне некоторых границ), говоря более строго – вне некоторого *компактного* множества; а также *гладкими*, то есть, дифференцируемыми сколько угодно раз.

Основная и обобщенная функции стоят внутри скалярного произведения, поэтому множество обобщенных функций является сопряженным множеству «основных».

Задача. Найти функционал, соответствующий *функции Хевисайда* $\theta(t)$:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & (t < 0) \\ 1 & (t \geq 0) \end{cases},$$

то есть, единичной «ступеньке».

Функция регулярная, поэтому действуем прямо по формуле (7.4):

$\theta(\varphi) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi(t)\theta(t) dt = \int\limits_{0}^{\infty} \varphi(t) dt$. Надеюсь, последний переход пояснять не надо.

Это и есть ответ! Получили «заместитель» функции Хевисайда – не очень-то нужный, так как функция прекрасно выражается обычным способом. Тем не менее, он пригодится!

Производные обобщенных функций

Приятная неожиданность: обобщенные функции можно дифференцировать, причем производные всегда существуют. Начнем с дельта-функции.

Ясно, что производная обобщенной функции – тоже обобщенная функция. То есть, производная $\delta(t-\tau)$ это (условно) функционал:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) \delta'(t-\tau) dt .$$

Производная обозначена штрихом.

Позвольте, но такое у нас уже было: задача с оператором дифференцирования! И ответ мы знаем:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t)\delta'(t-\tau)dt = -\varphi'(\tau).$$

В частности, при $\tau = 0$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t)\delta'(t)dt = -\varphi'(0).$$

Оказывается, «решение» той задачи на самом деле являлось определением производной дельта-функции – как обобщенной функции. Разумеется, интеграл слева не имеет буквального смысла, мы не знаем, как его «взять». Это просто символика перехода к записи функции как функционала $f(\varphi)$. Так будет и далее.

Итак, «заместителем» производной дельта-функции является функционал $-\varphi'(0)$. Можно ввести производную любой обобщенной функции, а не только дельта:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) f'(t)dt = -\int_{-\infty}^{\infty} \varphi'(t) f(t)dt. \qquad (7.5)$$

Или, в другой записи:

$$\langle \varphi(t),\ f'(t) \rangle = -\langle \varphi'(t),\ f(t) \rangle.$$

Производная $\varphi'(t)$ существует всегда – основные функции мы приняли дифференцируемыми сколько угодно раз. Это позволяет оперировать с производными обобщенных функций, не задумываясь, существуют ли они. Существуют!

«Правило переброса производной» (7.5) легко получается применением того же интегрирования по частям, вывод есть в учебнике, и нам неинтересен. Самостоятельно проверьте, что δ-функция сюда тоже подпадает. Важнее разобраться, что оно означает, и как пользоваться.

Задача 1. Найти производную функции Хевисайда $\theta(t)$.

Ищем как обобщенную функцию, поскольку в традиционном понимании «ступенька» Хевисайда не имеет производной при $t = 0$ (что нас совсем не устраивает). Уже выяснено, как предстает функция $\theta(t)$ в виде обобщенной:

$$\theta(\varphi) = \int_{0}^{\infty} \varphi(t)dt.$$

Под интегралом незримо сидит наша функция $\theta(t)$, то есть:

$$\theta(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \theta(t)\varphi(t)dt.$$

Нам надо получить $\theta'(\varphi)$, которая по определению равна:

$$\theta'(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \theta'(t)\varphi(t)dt.$$

Воспользуемся (7.5):

$$\theta'(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \theta'(t)\varphi(t)dt = -\int_{-\infty}^{\infty} \theta(t)\varphi'(t)dt = -\int_{0}^{\infty} \varphi'(t)dt.$$

Последний интеграл легко берется, и равен:

$-\varphi(t)\big|_0^\infty = 0 + \varphi(0)$, учитывая финитность функций $\varphi(t)$. Итак, $\theta'(\varphi) = \varphi(0)$, задача решена.

Однако не можем не заметить, что $\varphi(0)$ – «заместитель» дельта-функции! Полученный в задаче ответ означает: $\theta'(t) = \delta(t)$, и это нисколько не является неожиданностью. Имеем содержательный результат без необходимости какого-либо конкретного выбора множества основных функций $\varphi(t)$!

Задача 2. Является ли эрмитовым оператор дифференцирования?

Это означает, что надо проверить: равны ли:

$\left\langle x, \hat{D}y \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^* y' \, dt$ и $\left\langle \hat{D}x, y \right\rangle = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x'^* \, y dt$.

Из (7.5) мы знаем, что:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} x^* y' \, dt = -\int\limits_{-\infty}^{\infty} x'^* \, y dt .$$

Получилось: $\left\langle x, \hat{D}y \right\rangle = -\left\langle \hat{D}x, y \right\rangle$, то есть, ответ в принципе отрицательный. Как помним, подобный оператор называют антиэрмитовым. Известно, как превратить его в эрмитов: умножением на *i*. Для проверки можете теперь исследовать оператор $i\hat{D}$ тем же способом.

Эрмитовость $i\hat{D}$ – вывод чрезвычайно важный. Именно он определяет тот факт, что все дифференциальные уравнения квантовой механики содержат мнимую единицу.

Между прочим, вопрос тесно связан с тем, почему преобразование Фурье от производной приобретает мнимую единицу:

$$x'(\omega) = i\omega x(\omega) .$$

В самом деле, эрмитовость оператора не зависит от представления. Если в частотном представлении дифференцирование (неэрмитов оператор) превращается в умножение, оно не может быть умножением на вещественное число (эрмитов оператор). Зато эрмитов оператор $i\hat{D}$ превращается в частотном представлении в оператор умножения на $-\omega$: эрмитовость очевидна!

Ядро обратного оператора

Посмотрим, как должно соотноситься ядро прямого и обратного оператора. В конечномерном пространстве $\hat{A}\hat{A}^{-1} = I = \delta_{jk}$; вероятно, и здесь должно получиться нечто подобное.

Записываем $\hat{A}x$ в интегральной форме:

$$y(u) = \int A(t, u) x(t) dt . \qquad (7.6)$$

Что такое эта *u* – нам неважно.

Теперь возвращаемся назад к $x(t)$ через обратный.

$$x(t) = \int A^{-1}(u, t) y(u) du . \qquad (7.7)$$

Заметьте, в ядре переменялись местами *t* и *u*, поскольку интегрируем уже по *u*.

И подставляем (7.6) в (7.7):

$$x(t) = \int A^{-1}(u, t) \left(\int A(\tau, u) x(\tau) d\tau \right) du .$$

Переменную интегрирования внутри переименовали в τ, чтобы не было путаницы с t снаружи интеграла – ведь это разные по смыслу переменные.

Поскольку $A^{-1}(u,t)$ не содержит переменной интегрирования τ, ее можно внести под внутренний интеграл просто как константу:

$$x(t)=\int\int A(\tau,u)A^{-1}(u,t)x(\tau)d\tau du\,.$$

Изменим порядок интегрирования (что в двойном интеграле допускается):

$$x(t)=\int\left[\int A(\tau,u)A^{-1}(u,t)du\right]x(\tau)d\tau\,.$$

$x(\tau)$ вынесли наружу, так как от переменной интегрирования u он не зависит.

Квадратные скобки равны, очевидно, $\delta(\tau-t)$, сравните:

$$x(t)=\int\delta(\tau-t)x(\tau)d\tau\,.$$

Таким образом:

$$\int A(\tau,u)A^{-1}(u,t)du=\delta(\tau-t)\,,$$

или, переименовывая τ и t:

$$\int A(t,u)A^{-1}(u,\tau)du=\delta(t-\tau) \qquad (7.8)$$

Получили условие того, что операторы $\hat{A}$ и $\hat{A}^{-1}$ являются взаимно обратными. Его можно также записать:

$$\hat{A}A^{-1}(\tau)=\delta(t-\tau)\,, \qquad (7.8а)$$

потому как $\int A(t,u)[...]du$ и есть оператор $\hat{A}$. Оператор от ядра своего же обратного это дельта-функция. Поскольку справа в (7.8а) никакой u нет, логично предположить, что и $\hat{A}^{-1}$ является функцией разности $(t-\tau)$:

$$\hat{A}A^{-1}(t-\tau)=\delta(t-\tau)\,, \qquad (7.8б)$$

В самом деле, получили аналог n-мерного соотношения. Проверим наше правило для операторов, являющихся заведомо обратными: $\hat{A}x(t)=\tau x(\tau)$ и $\hat{A}^{-1}x(\tau)=\frac{1}{t}x(t)$. Как известно по одной из задач, ядро $\hat{A}^{-1}$ выглядит:

$$A^{-1}(t,\tau)=A^{-1}(t-\tau)=\frac{1}{\tau}\delta(t-\tau)\,.$$

Тогда $\hat{A}x(t)=\tau\frac{1}{\tau}\delta(t-\tau)=\delta(t-\tau)$, как и должно быть согласно (7.8б).

Ядро эрмитового оператора

В конечномерном пространстве $A=(A^T)^*$; и здесь мы ожидаем чего-то похожего.

Пусть оператор $\hat{G}$ с ядром $G(t,u)$ эрмитов. По определению это означает:

$$\left\langle x,\hat{G}y\right\rangle=\left\langle \hat{G}x,y\right\rangle.$$

Развернем скалярные произведения:

$$\int x^*(t)\hat{G}y(t)dt=\int\left[\hat{G}x(t)\right]^*y(t)dt\,.$$

Теперь развернем и операторы:

$$\int x^*(t)\left(\int y(u)G(u,t)du\right)dt = \int\left(\int x(u)G(u,t)du\right)^* y(t)dt\,.$$

Внесем функции времени во внутренние интегралы (для которых t – просто параметр), и получим:

$$\int\int x^*(t)y(u)G(u,t)dudt = \int\int x^*(u)G^*(u,t)y(t)dudt\,.$$

Справа учтено правило: чтобы получить комплексное сопряжение произведения, надо каждый сомножитель заменить на сопряженный.

Рассмотрим внимательно, что у нас получилось. Просто поменяем местами u и t – например, справа (ведь переменная интегрирования безразлична):

$$\int\int x^*(t)y(u)G(u,t)dudt = \int\int x^*(t)G^*(t,u)y(u)dudt\,.$$

Очевидно, что равенство будет соблюдаться, если:

$$G(u,t) = G^*(t,u)\,. \qquad (7.9)$$

Оператор эрмитов, если перестановка u и t в ядре эквивалентна его комплексному сопряжению. В точности то же самое, как для матричного представления: транспонирование матрицы обнуляется переходом к сопряженной!

Получили признак эрмитового оператора через свойство его ядра.

Задача 1. Убедиться новым способом, что оператор $i\hat{D}$ эрмитов.

Как мы знаем, ядром оператора дифференцирования $\hat{D}$ является $-\dfrac{d\delta(t-\tau)}{dt}$, соответственно, оператор $i\hat{D}$ имеет ядро $G(t,\tau) = -i\dfrac{d\delta(t-\tau)}{dt}$.

Перемена мест t и τ меняет знак: $G(\tau,t) = i\dfrac{d\delta(\tau-t)}{dt}$. Потому что производная четной функции (дельта-функции) всегда является нечетной.

Теперь возьмем комплексное сопряжение. Дельта-функция и ее производная вещественны, значит, наше ядро чисто мнимое. Просто меняем знак на противоположный, и вот результат:

$$G^*(\tau,t) = -i\frac{d\delta(t-\tau)}{dt} = G(t,\tau)\,.$$

Равенство (7.9) соблюдается, проверка на эрмитовость пройдена.

Задача 2. Проверить на эрмитовость *преобразование Гильберта*:

$$y(\tau) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x(t)}{\tau-t}dt\,.$$

Ядро оператора $G(t,\tau) = \dfrac{1}{\pi(\tau-t)}$. Очевидно, что $G^*(\tau,t) = \dfrac{1}{\pi(t-\tau)} \neq G(t,\tau)$. Но оператор антиэрмитов, и знакомый прием (домножение на i) поможет довести его до эрмитового:

$$G(t,\tau) = \frac{i}{\pi(\tau-t)},\ G^*(\tau,t) = \frac{-i}{\pi(t-\tau)} = \frac{i}{\pi(\tau-t)} = G(t,\tau)\,.$$

Задача 3. Убедиться, что оператор Гамильтона $\hat{H}$ эрмитов.

Вероятно, забыли уже дифференциальное уравнение унитарной эволюции (2.12)? Вот оно:

$$-i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}\Psi\,.$$

Дальше разберитесь сами.

Ядро унитарного оператора

Теперь попробуем разобраться с ядром унитарного оператора. Будем исходить из определения: для унитарного оператора обратный совпадает с эрмитово-сопряженным. Запишем формально:

$\hat{U}^{+}\hat{U}x = x$.

С прямым и обратным операторами мы разобрались, работает (7.8):

$\int U(\tau, u)U^{-1}(u, t)du = \delta(\tau - t)$.

Как получить эрмитово-сопряженный оператор в интегральном представлении, тоже известно: в ядре поменять местами индексы (переменные), и вдобавок перейти к комплексному сопряжению.

Следовательно, на место $U^{-1}(u, t)$ мы должны подставить $U^{+}(u, t) = U^{*}(t, u)$. Получаем условие унитарности:

$$\int U(\tau, u)U^{*}(t, u)du = \delta(\tau - t). \qquad (7.10)$$

Между прочим, унитарные операторы нам уже знакомы – переход от временного представления к частотному и обратно. Была получена формула:

$$\delta(t - \tau) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}e^{i\omega\tau}d\omega. \qquad (7.11)$$

Нетрудно проверить, что здесь имеем пример (7.10). В (7.11) делаем замену обозначений: $t \to \tau$, $\tau \to t$, $\omega \to u$. Теперь оно предстанет так:

$$\delta(\tau - t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-iu\tau}e^{iut}du.$$

Сошлось с (7.10)!

Задача. Найти ядро оператора сдвига на постоянную величину *T*, преобразующего $x(t)$ в $x(t - T)$. Убедиться, что оператор унитарный.

Запишем формально то, что хотим получить:

$x(\tau - T) = \int x(t)A(t, \tau)dt$.

Очевидно, что $A(t, \tau) = \delta[t - (\tau - T)] = \delta(t + T - \tau)$, и первое задание выполнено:

$x(\tau - t_0) = \int x(t)\delta(t + T - \tau)dt$.

Проверяем унитарность. Должно быть:

$\int U(\tau, u)U^{*}(t, u)du = \delta(\tau - t)$.

Здесь важно не запутаться в буквах. Итак:

$U(t, \tau) = \delta(t + T - \tau)$;

$U(\tau, u) = \delta(\tau + T - u)$, $U^{*}(t, u) = \delta(t + T - u)$.

$\int U(\tau, u)U^{*}(t, u)du = \int \delta(\tau + T - u)\delta(t + T - u)du$.

Пользуемся стандартным свойством δ-функции (не забывая, что она четна):

$\int x(u)\delta(u - t - T)du = x(t + T)$.

Значит, наш интеграл превращается в $\delta(\tau + T - t - T) = \delta(\tau - t)$.

Все в порядке.

Представления оператора

Собственно говоря, задачи наводят на мысль, что не только векторы (то есть, функции), но и операторы меняют свой вид при смене представления. К примеру, оказалось, что дифференцирование по времени во временном представлении – в частотном соответствует просто умножению на $i\omega$. Решим сначала задачу.

Задача 1. Перевести оператор сдвига в частотное представление, то есть, найти:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x(t-T)e^{-i\omega t}dt.$$

Напрашивается замена переменных: $t-T$ обозначим θ. Теперь:

$$x(t-T)\to x(\theta),\ dt\to d\theta,\ e^{-i\omega t}\to e^{-i\omega(\theta+T)}=e^{-i\omega\theta}e^{-i\omega T}.$$

Последний сомножитель выносится за интеграл:

$$e^{-i\omega T}\left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x(\theta)e^{-i\omega\theta}d\theta\right],$$

выражающий попросту $x(\omega)$. Значит, образом $x(t-T)$ является $e^{-i\omega T}x(\omega)$.

Задача, конечно, легкая; чаще всего простых решений не получается. Рассмотрим общий случай; имеем:

$$y(\tau)=\hat{A}x(t).$$

Это временные представления векторов (функций) x и y. Можно от той и другой функции взять преобразование Фурье, и записать:

$y(\upsilon)=\hat{B}x(\omega)$, где $\hat{B}$ – некоторый (пока неизвестный) оператор, тоже линейный, являющийся тем же самым $\hat{A}$, но в частотном представлении. Его можно представить в форме интегрального преобразования:

$$y(\upsilon)=\hat{B}x(\omega)=\int x(\omega)B(\omega,\upsilon)d\omega. \qquad (7.12)$$

Пришлось ввести «альтернативную частоту» υ, аналогично тому, как появилось «альтернативное время» τ.

Интересует ядро $B(\omega,\upsilon)$: как объяснялось, оно-то и является представителем оператора. Задача решаема в общем виде, если $\hat{A}$ эрмитов.

Попросту выразим $y(\upsilon)$ как преобразование Фурье от $y(\tau)$:

$$y(\upsilon)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int y(\tau)e^{-i\upsilon\tau}d\tau=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int \hat{A}x(t)e^{-i\upsilon\tau}d\tau.$$

Так как интеграл являет собой скалярное произведение $\left\langle \hat{A}x(t), e^{-i\upsilon\tau}\right\rangle$, мы вправе отнести действие оператора $\hat{A}$ (эрмитового!) не к первому, а ко второму сомножителю, получив:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int x(t)\hat{A}e^{-i\upsilon\tau}dt.$$

Переменная интегрирования заменена на t, так как под интегралом теперь функции от t.

Вставим на место $x(t)$ обратное преобразование Фурье и несколько перетасуем:

$$y(\upsilon)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left[\int x(\omega)e^{i\omega t}d\omega\right]\hat{A}e^{-i\upsilon\tau}dt=\int\left(\frac{1}{2\pi}\int e^{i\omega t}\hat{A}e^{-i\upsilon\tau}dt\right)x(\omega)d\omega. \qquad (7.13)$$

Мы ожидали выражения типа (7.12), его и получили! То, что в скобках – ядро оператора $\hat{A}$ в частотном представлении:

$$B(\omega, \upsilon) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i\omega t} \hat{A} e^{-i\upsilon\tau} dt .$$

Сопоставьте с формулой (2.4) преобразования в другую систему координат для матриц: $A' = UAU^{-1}$, припоминая, что $\frac{e^{i\omega t}}{\sqrt{2\pi}}$ – ядро унитарного оператора.

Задача 2. Проверить выкладки на знакомом операторе, который заведомо эрмитов: $\hat{A}x = ix'$.

Здесь получаем:

$$\hat{A} e^{-i\upsilon\tau} = i \frac{d(e^{-i\upsilon\tau})}{d\tau}, \text{ что дает } -\upsilon e^{-i\upsilon t} .$$

Заметьте: в окончательном выражении мы заменили $\tau \to t$, так как оператор всегда обязан замещать индекс (в данном случае «континуальный»).

$$B(\omega, \upsilon) = -\frac{1}{2\pi} \int \upsilon e^{i\omega t} e^{-i\upsilon t} dt = -\frac{\upsilon}{2\pi} \int e^{i(\omega-\upsilon)t} dt .$$

Как известно, см. 5.4:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\upsilon)t} dt = \delta(\omega - \upsilon). \text{ Итак: } B(\omega, \upsilon) = -\upsilon\delta(\omega - \upsilon) .$$

Проверим (12):

$$y(\upsilon) = -\int x(\omega)\left[\upsilon\delta(\omega - \upsilon)\right] d\omega = -\upsilon \int x(\omega)\delta(\omega - \upsilon) d\omega = -\upsilon x(\upsilon) .$$

Так и должно быть: мы знали, что $x'(\omega) = i\omega x(\omega)$, $y(\omega) = ix'(\omega) = -\omega x(\omega)$.

* * *

Тематика линейной теории не завершена, далее предстоит подступиться к линейным дифференциальным уравнениям. Предмет для физики крайне важный, а особенно дифференциальные уравнения с частными производными. Почему именно они? Объект пристального внимания физики – поля и сплошные среды, которые отображаются функциями многих переменных. Но этим займемся уже в следующей части.