MQI: Cours 1

Espaces de Hilbert
Notations de Dirac

Espaces de Hilbert

David Hilbert, né en 1862 à Königsberg et mort en 1943 à Gottingen, est un mathématicien allemand. Il est souvent considéré comme un des plus grands mathématiciens du xx^{e} siècle. Il a créé ou développé un large éventail d'idées fondamentales, que ce soit la théorie des invariants, l'axiomatisation de la géométrie, ou les fondements de l'analyse fonctionnelle (avec les espaces de Hilbert). (source Wikipedia).

Forme « sesquilinéaire »

Soit E un espace vectoriel **complexe** muni d'une application $B: E\times E \to \mathbb{C}$ telle que:

- B est **linéaire à droite**:

$$\forall\lambda,\mu \in \mathbb{C}, \forall u,v,w \in E, B(u,\lambda\,\mathrm{v}+\mu\,\mathrm{w}) = \lambda\,\mathrm{B}(\mathrm{u},\mathrm{v}) + \mu\,B(u,w),$$

- B est « **anti-linéaire** » **à gauche**:

$$\forall\lambda,\mu \in \mathbb{C}, \forall u,v,w \in E, B(\lambda\,u+\mu\,\mathrm{v},\mathrm{w}) = \lambda^*\,\mathrm{B}(\mathrm{u},w) + \mu^* B(v,w),$$

- B possède la « symétrie » hermitienne ou hilbertienne:

$$\forall u,v \in E, B(u,v)^* = B(v,u)$$

$\Rightarrow$ B est alors appelée **forme sesquilinéaire** sur E.

- B est dite **positive** si $\forall \mathrm{u} \in E, B(u,u) \geq 0,$
- B est dite **définie** si $B(u,u) = 0 \iff \mathrm{u}=0.$

$\Rightarrow$ Une **forme sesquilinéaire définie positive** sur E est appelée **produit scalaire hermitien ou hilbertien**.

Espaces hermitiens, Espaces de Hilbert

Soit E un espace vectoriel complexe muni d'un produit scalaire hermitien/hilbertien $B(u,v)$

✦ On note alors: $\boxed{(u|v) = B(u,v).}$

✦ Le produit scalaire $(u|v)$ munit l'espace E d'une norme $\boxed{\|u\| = \sqrt{(u|u)}.}$

✦ Les espaces vectoriels complexes de **dimension finie** muni de $(u|v)$ sont appelés « **Espaces hermitiens** ».

✦ D. Hilbert a généralisé cette structure aux espaces de **dimension infinie,** en particulier aux espaces de fonctions: ce sont les « **Espaces de Hilbert** ».
Les espaces hermitiens sont donc un cas « simplifié » d'espaces de Hilbert.

<u>Remarque</u>: les espaces de Hilbert rentrent dans le cadre mathématique plus général des espaces vectoriels normés complets, appelés « espaces de Banach » (étudiés par Stephan Banach grand mathématicien polonais, contemporain de D. Hilbert, et un des fondateurs de « l'analyse fonctionnelle »).

Exemples (1)

Dimension finie

✦ Soit $\boxed{E = \mathbb{C}^n}$ E est un espace de Hilbert pour le produit scalaire:

$$\boxed{(u|v) = \sum_{i=1}^{n} u_i^* \, v_i} \text{ avec } u = (u_1, \dots u_n), v = (v_1, \dots v_n).$$

✦ On peut aussi adopter une notation « colonne » pour les vecteurs de $E = \mathbb{C}^n$:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \text{ et } \boxed{(u|v) = u^\dagger . v} = \sum_{i=1}^{n} u_i^* \, v_i$$

Avec:

$$u^\dagger = (u_1^*, \dots, u_n^*) = (u^*)^t.$$

Produit « matriciel » ligne-colonne

$u^\dagger \equiv$ **adjoint ou transconjugué**

Exemples (2)

Dimension infinie

✦ Soit :

$$E = \{\phi: \mathbb{R} \to \mathbb{C} | \int |\phi(x)|^2 \, dx < \infty\} \equiv L^2(\mathbb{R})$$

muni du produit scalaire:

$$(\phi|\psi) = \int \phi(x)^* \psi(x) \, dx$$

E est **l'espace de Hilbert des « fonctions de carré sommable ».**

Rappels: dimension finie (1)

$\mathcal{H}$ un espace de Hilbert de dimension n dans ces rappels

✦ Une base $\{e_i\}_{i=1}^{n}$ de $\mathcal{H}$ est dite **orthonormée** ssi: $\boxed{\forall i,j, \left(e_i \middle| e_j\right) = \delta_{ij}}$ (où δ_{ij} est le symbole de Kronecker: $\delta_{ii} = 1$ et $\delta_{ij} = 0$ si $i \neq j$).

✦ Si $\{e_i\}_{i=1}^{n}$ est une base orthonormée de $\mathcal{H}$ alors:

$$\boxed{\forall \phi \in \mathcal{H}, \phi = \sum_{i=1}^{n} (e_i|\phi)\, e_i}$$

D'où:

$$\boxed{\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}, (\psi|\phi) = \sum_{i=1}^{n} (\psi|e_i)(e_i|\phi) \text{ et } ||\phi||^2 = \sum_{i=1}^{n} |(e_i|\phi)|^2.}$$

✦ Soit $\hat{A}$ un opérateur linéaire sur $\mathcal{H}$, on définit l'**adjoint** $\hat{A}^\dagger$de $\hat{A}$ par:

$$\boxed{\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}, \left(\psi \middle| \hat{A}^\dagger \phi\right) = (\phi|\hat{A}\psi)^*}$$

Dans une base orthonormée $\{e_i\}_{i=1}^{n}$ on a:

$$\boxed{\left(e_i \middle| \hat{A}^\dagger e_j\right) = (e_j|\hat{A}e_i)^*}$$

Rappels: dimension finie (2)

Opérateurs

✦ Soit $\hat{A}$ un opérateur linéaire sur $\mathcal{H}$ et $\{e_i\}_{i=1}^{n}$ une base orthonormée alors:

$$\hat{A}e_j = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} e_i \Leftrightarrow a_{ij} = (e_i|\hat{A}e_j)$$

« Elément de matrice »

✦ Si l'on note $[\hat{A}]$ la matrice a_{ij} représentant $\hat{A}$ dans la base $\{e_i\}_{i=1}^{n}$, alors la matrice $[\hat{A}^\dagger]$ représentant l'adjoint $\hat{A}^\dagger$ est donnée par $[\hat{A}^\dagger] = \left([\hat{A}]^*\right)^t \equiv [\hat{A}]^\dagger$ (« † » = transconjugaison).

✦ Un opérateur linéaire est dit **hermitien** ou **auto-adjoint** (en dimension infinie) ssi $\hat{\boldsymbol{A}} = \hat{\boldsymbol{A}}^\dagger$.

✦ **Tout opérateur linéaire hermitien est diagonalisable en base orthonormée et ses valeurs propres sont réelles**:

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger \Rightarrow \exists(\lambda_i)_{i=1,\dots n}, \lambda_i \in \mathbb{R}, \exists\{e_i\}_{i=1}^{n} \text{ orthonormée,} |\ \hat{A}e_i = \lambda_i e_i$$

✦ Si $\hat{\boldsymbol{A}}$ **et** $\hat{\boldsymbol{B}}$ **sont hermitiens et** $\hat{\boldsymbol{A}}\,\hat{\boldsymbol{B}} = \hat{\boldsymbol{B}}\hat{\boldsymbol{A}}$ (ils « commutent ») alors $\hat{\boldsymbol{A}}$ **et** $\hat{\boldsymbol{B}}$ **sont diagonalisables dans une base orthonormée commune**.

Rappels: dimension finie (3)

Projecteurs orthogonaux

✦ **Projecteur orthogonal (définition)**: opérateur $\hat{\Pi}$ tel que: $\hat{\Pi} = \hat{\Pi}^\dagger$ et $\hat{\Pi}^2 = \hat{\Pi}$.

✦ Tout vecteur $u \in \mathcal{H}$ tel que $||u|| = 1$ définit un projecteur orthogonal $\hat{\Pi}_u$ tel que

$$\forall \phi \in \mathcal{H}, \hat{\Pi}_u \phi = (u|\phi)\, u \Rightarrow \hat{\Pi}_u u = u.$$

✦ Tout projecteur orthogonal $\hat{\Pi}$ peut s'écrire sous la forme

$$\hat{\Pi} = \sum_{i=1}^{K} \hat{\Pi}_{e_i} \text{ avec } (e_i|e_j) = \delta_{ij}\,,$$

$\{e_i\}_{i=1}^{K}$ est un « **système orthogonal** ».

✦ Si $\{e_i\}_{i=1}^{n}$ est une base orthonormée, on a la « **résolution de l'identité** »:

$$\sum_{i=1}^{n} \hat{\Pi}_{e_i} = Id_{\mathcal{H}}.$$

✦ Si $\hat{A}$ est hermitien $(\lambda_i)_{i=1\ldots n}$ les valeurs propres et $(e_i)_{i=1\ldots n}$ les vecteurs propres, $||e_i|| = 1$,

$$\sum_{i=1}^{n} \lambda_i \hat{\Pi}_{e_i} = \hat{A}.$$

Résolution spectrale de $\hat{A}$

Espaces de Hilbert: dimension infinie (1)

D. Hilbert a montré que pour tous les espaces dits « **séparables** » (en pratique ils le sont tous en Physique), un certain nombre de propriétés du cas « dimension finie » pouvaient être prolongées (mais pas toutes: c'est l'objet de « l'analyse fonctionnelle hilbertienne »).

✦ Tout espace de Hilbert $\mathcal{H}$ « séparable » possède des bases orthonormées « discrètes » $\{e_i\}_{i=1}^{\infty}$ (donc avec $\left(e_i \middle| e_j\right) = \delta_{ij}$). (On parle aussi de « système orthogonal total, ou complet »).

✦ Dans ces bases les formules de la dimension finie sont généralisables:

$$\forall \phi \in \mathcal{H}, \phi = \sum_{i=1}^{\infty} (e_i|\phi)\, e_i$$

$$\forall \phi, \psi \in \mathcal{H}, (\psi|\phi) = \sum_{i=1}^{\infty} (\psi|e_i)(e_i|\phi) \text{ et } \|\phi\|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |(e_i|\phi)|^2.$$

✦ **Résolution de l'identité**:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \widehat{\Pi}_{e_i} = Id_{\mathcal{H}}.$$

Espaces de Hilbert: dimension infinie (2)

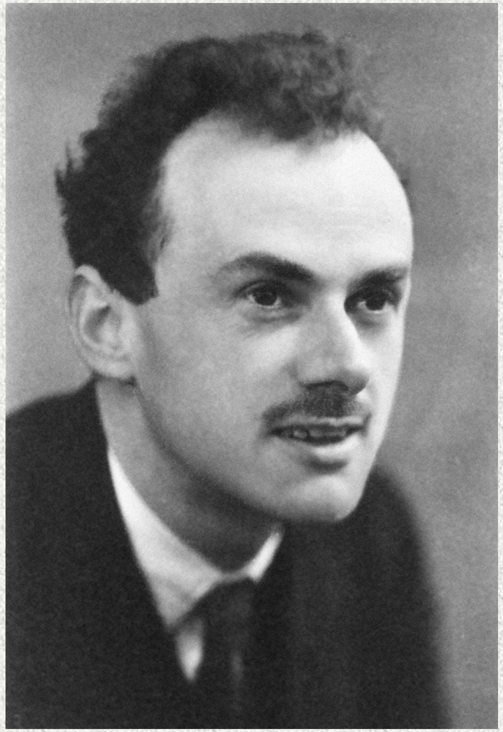
✦ On peut prolonger les notions d'adjoint d'un opérateur, d'opérateurs hermitiens (on parle alors en maths « d'opérateurs auto-adjoints »), et on peut prolonger les théorèmes qui vont avec ces définitions (diagonalisation).

Remarque importante: Il y a cependant de nouvelles « situations » qui apparaissent, spécifiques de la dimension infinie, et que l'on verra plus tard.

✦ Paul Dirac a montré que les « manipulations mathématiques » pouvaient être grandement simplifiées si on adopte un « mode de notation » particulier appelé:

« **notations de Dirac** »

Notations de Dirac



Paul Adrien Maurice Dirac (né le 8 août 1902 à Bristol, Angleterre – mort le 20 octobre 1984 à Tallahassee, Floride, USA) est un mathématicien et physicien britannique. Il est l'un des « pères » de la Mécanique Quantique et a prévu l'existence de l'antimatière.
Il est colauréat avec Erwin Schrödinger du prix Nobel de physique de 1933 « pour la découverte de formes nouvelles et utiles de la théorie quantique ». (source Wikipedia)

Notations de Dirac: « Bras » et « Kets »

Idée de P. Dirac: « Formaliser » de manière générale le comportement matriciel déjà vu:

$$u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix}, v = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \text{ et } (u|v) = u^\dagger . v$$

✦ On dira que les vecteurs ϕ d'un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ sont des « **kets** », notés $|\phi\rangle$.
Donc à la place de $u = \lambda\phi + \mu\psi$, on notera $|u\rangle = \lambda|\phi\rangle + \mu|\psi\rangle$ (avec λ et $\mu \in \mathbb{C}$).

✦ On introduit une **opération formelle** « † » :

- « † » est anti-linéaire (anti => transforme $\mu \in \mathbb{C}$ en μ^*),
- $(\dagger)^2 \equiv$ Identité
- « † » transforme un « **ket** » $|\phi\rangle$ en un « **bra** » $\langle\phi| \equiv |\phi\rangle^\dagger$

Donc $$(\lambda|\phi\rangle + \mu|\psi\rangle)^\dagger = \lambda^* \langle\phi| + \mu^*\langle\psi|.$$

Mathématiquement un « bra » est une « forme linéaire ».

✦ Le « **produit** » **d'un <u>bra par un ket</u>** (dans ce sens uniquement) est le **produit scalaire**:

$$\langle\psi| \rightarrow . \leftarrow |\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle = (\psi|\phi)$$

Dans la suite je noterai le produit scalaire $\langle\psi|\phi\rangle$

Notations de Dirac: bras, kets et opérateurs

Soient deux « kets » $|\phi\rangle$, $|\psi\rangle$ et deux opérateurs $\hat{A}$ et $\hat{B}$.

- Mathématiquement on peut définir le vecteur $\hat{A}|\phi\rangle$, et le produit scalaire $(\psi|\hat{A}\phi)$
- En notations de Dirac $(\psi|\hat{A}\phi)$ devient $\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle \equiv \langle\psi|.(\hat{A}|\phi\rangle)$

Notation complètement symétrique

- L'opération « † » s'étend aux opérateurs: c'est l'adjoint $\hat{A} \to \hat{A}^\dagger$
- L'opération « † » inverse toujours l'ordre des éléments:

Exemples: $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$ et $(\hat{A}|\phi\rangle)^\dagger = |\phi\rangle^\dagger\hat{A}^\dagger = \langle\phi|\hat{A}^\dagger$

- **Exemple de « calcul »** avec les notations de Dirac:

$$\langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^* = \langle\psi|\hat{A}|\phi\rangle^\dagger = (\langle\psi|.\hat{A}.|\phi\rangle)^\dagger = |\phi\rangle^\dagger\hat{A}^\dagger\langle\psi|^\dagger = \langle\phi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle$$

Car pour $z \in \mathbb{C}$, $z^\dagger = z^*$

Notations de Dirac: opérateurs, projecteurs orthogonaux

✦ Soit le vecteur (un ket) $|u\rangle \in \mathcal{H}$ « **normalisé** » ($\langle \boldsymbol{u}|\boldsymbol{u}\rangle = \mathbf{1}$), on a le projecteur orthogonal $\widehat{\Pi}_u$:

$$\forall |\phi\rangle \in \mathcal{H}, \qquad \widehat{\Pi}_u|\phi\rangle = \langle u|\phi\rangle\ |u\rangle \equiv |u\rangle\langle u|\phi\rangle \equiv (|u\rangle\langle u|).|\phi\rangle$$

Formellement: ➡ $\boxed{\widehat{\Pi}_u = |u\rangle\langle u|.}$

✦ ➡ **Le produit « ket » « bra » => opérateur**

✦ Si $\{e_i\}_{i=1}^{\infty}$ est une base orthonormée (complète) on a la **résolution de l'identité**:

$$\sum_{i=1}^{\infty} |e_i\rangle\langle e_i| = Id_{\mathcal{H}}.$$

⬅ appelée aussi **relation de fermeture**

✦ Si $\hat{A}$ est hermitien de valeurs propres $(\lambda_i)_{i=1,\dots,\infty}$ et de vecteurs propres normalisés $(e_i)_{i=1,\dots,\infty}$ (formant une base orthonormée), on a « **la résolution spectrale** » de $\hat{A}$ qui s'écrit:

$$\sum_{i=1}^{\infty} \lambda_i |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{A}.$$ ⬅

Notations de Dirac: opérateurs, encore

Soit $\hat{A}$ un opérateur et $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ une base orthonormée (complète). Comment « écrire » $\hat{A}$ dans la base $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ avec les notations de Dirac?

→ **Grâce à la « relation de fermeture »**

$$\hat{A} = Id_{\mathcal{H}} \hat{A}\, Id_{\mathcal{H}} \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^{\infty} |e_i\rangle \langle e_i| = Id_{\mathcal{H}} \Rightarrow \hat{A} = \sum_i \sum_j |e_i\rangle \underbrace{\langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle}_{\in \mathbb{C}} \langle e_j| = \sum_{ij} \langle e_i|\hat{A}|e_j\rangle\, \boxed{|e_i\rangle\langle e_j|}$$

$$\widehat{K}_{ij} = |e_i\rangle\langle e_j|$$

Adjoint de $\widehat{K}_{ij}$?

$$\widehat{K}_{ij}^{\dagger} = (|e_i\rangle\langle e_j|)^{\dagger} = \langle e_j|^{\dagger} . |e_i\rangle^{\dagger} = |e_j\rangle\langle e_i| = \widehat{K}_{ji}$$

Notations de Dirac: changements de base orthonormée

Soient $\{|e_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ et $\{|f_i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$ deux bases orthonormées (complètes), appelons $\hat{U}$ l'opérateur de changement de base tel que $\hat{U}|e_i\rangle = |f_i\rangle$.

✦ Alors $\hat{U}|e_i\rangle\langle e_i| = |f_i\rangle\langle e_i|$ $\Rightarrow$ $\sum_i |f_i\rangle\langle e_i| = \hat{U}\sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{U}\ Id_{\mathcal{H}} = \hat{U}$

✦ Adjoint $\hat{U}^\dagger$ $\Rightarrow$ $\hat{U}^\dagger = \left(\sum_i |f_i\rangle\langle e_i|\right)^\dagger = \sum_i |e_i\rangle\langle f_i|$

✦ $\hat{U}$ est donc un opérateur **unitaire, i.e.** : $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = Id_{\mathcal{H}}$

Preuve $\hat{U}^\dagger\hat{U} = \left(\sum_i |e_i\rangle\langle f_i|\right)\left(\sum_j |f_j\rangle\langle e_j|\right) = \sum_{ij} |e_i\rangle\langle e_j|\,\delta_{ij} = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = Id_{\mathcal{H}}$

FIN DU COURS 1