Hilberträume und Skalarprodukte

18. März 2019

Der sogenannte Hilbertraum ist jener Raum, der die Zustandsvektoren enthält. Er ist mehr als ein einfacher Vektorraum - doch sehen Sie selbst.

Einstiegsbeispiele

$$\left|\mathbb{C}^n\right\rangle$$

E1 Berechnen Sie die (komplexen) Skalarprodukte $\langle v, v\rangle$, $\langle w, w\rangle$, $\langle v, w\rangle$ und $\langle w, v\rangle$ der beiden Vektoren $v = \begin{pmatrix} 2i \\ 3 \end{pmatrix}$ und $w = \begin{pmatrix} -3 \\ i \end{pmatrix}$.

E2 Zeigen Sie mit Hilfe der Vektorraumaxiome, dass der $\mathbb{C}^2$ ein Vektorraum ist.

1 Der Hilbertraum

Das Gute ist, dass wir bereits Hilberträume kennen beziehungsweise alle ihre Bestandteile, diese jedoch nicht so bezeichnet haben. Wir wollen damit beginnen eine Definition des Hilbertraums anzugeben und diese anschließend zu diskutieren.

> Unter einem Hilbertraum versteht man einen reellen oder komplexen Vektorraum, der bezüglich einer Norm
>
> $$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}$$
>
> vollständig[a] ist. Diese Norm wird über ein Skalarprodukt definiert.
>
> [a] Vollständig bedeutet, dass jede Cauchyfolge in dem betrachteten Raum konvergiert. Cauchyfolgen sind Folgen, die sich in ihrem Verlauf einem Grenzwert annähern.

Da diese Definition erstmals ungewohnt klingt, wollen wir ihre Teile einmal separat betrachten. Im Wesentlichen benötigen wir für die Konstruktion eines Hilbertraums zwei Dinge.

1. Einen Vektorraum
2. Ein Skalarprodukt

Im Baustein „Vektoren" haben wir das Konzept des Vektorraums bereits diskutiert und haben gesehen, dass der Vektorraum sehr allgemein definiert ist. Auch über Skalarprodukte haben wir bereits gesprochen und somit können wir zwei für die Physik sehr wichtige Hilberträume als Beginn unserer Anschauungen verwenden. Überlegen Sie sich welche Eigenschaften diese beiden Strukturen gemeinsam haben.

- Der Vektorraum $\mathbb{R}^n$ mit dem Standardskalarprodukt bildet einen Hilbertraum.
- Der Vektorraum $\mathbb{C}^n$ mit dem komplexen Skalarprodukt bildet ebenso einen Hilbertraum

Das Erste, dass Ihnen womöglich in den Sinn kommt ist die Tatsache, dass die Elemente durch ein Zahlen-Tupel dargestellt werden können. Wir wollen uns hier jedoch noch einmal überlegen, was diese Zahlen genau bedeuten.
Wie wir bereits ganz am Beginn des Bausteins „Vektoren" gesehen haben kann jeder Vektor als Linearkombination seiner Basisvektoren geschrieben werden. Zur Erinnerung sei hier ein Beispiel angegeben:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + 5 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Nun stellt sich die Frage, ob wir dieses Konzept auf andere „Vektoren“ erweitern können, dabei soll ein Vektor lediglich als Element des Vektorraums gesehen werden und nicht als Zahlentupel oder gerichtete Größe (Pfeil). Kurz zusammengefasst bedeutet das, dass wir Vektoren addieren wollen und mit Zahlen[1] multiplizieren[2].
Als erstes Beispiel für einen abstrakteren Vektorraum wollen wir uns die **Polynome[3] vom Grad 2** ansehen. Versuchen Sie sich bevor Sie weiterlesen darüber klar zu werden, warum es sich hierbei um einen Vektorraum handelt (Ü1).
Jedes Polynom ist eine Summe von Potenzen. In unserem Fall ist die höchst vorkommende Potenz x^2. Die Basis dieses Vektorraums bilden die Potenzen x^2, x und $x^0 = 1$. Betrachten wir nun beispielsweise das Polynom

$$p(x) = 2x^2 + 5x - 3$$

so könnte man es als Zahlentupel in der Form $\begin{pmatrix} 2 & 5 & -3 \end{pmatrix}$ schreiben. Es ist leicht einzusehen, dass diese Darstellung eindeutig ist und die Vektorraumaxiome erfüllt. Obwohl es möglich ist jedes Polynom vom Grad 2 durch drei Zahlen eindeutig festzulegen, würde es wenig Sinn machen diese Tupel als Pfeile im Raum darzustellen[4].

Gut, die Polynome als Vektorraum zu sehen haben wir uns nun klar gemacht, doch für den Hilbertraum fehlt uns noch das Skalarprodukt. Das Skalarprodukt, wie wir es bei den Vektoren über den Satz des Pythagoras eingeführt haben ist hier womöglich nicht zweckmäßig. Das hat den Grund, dass die räumliche Vorstellung der Länge hier nicht mehr anwendbar ist. Aus diesem Grund werden wir im nächsten Kapitel eine formalere Definition des Skalarproduktes anstreben.

2 Skalarprodukt - Schon wieder

In diesem Kapitel werden wir damit beginnen das Skalarprodukt über drei Eigenschaften zu definieren, die sich für ein reelles und ein komplexes Skalarprodukt minimal unterscheiden. Diese Art der Definition des Skalarprodukts fällt in das Gebiet der axiomatischen Geometrie.

[1]Für uns reicht es hier nur reelle und komplexe Zahlen zu betrachten. Man könnte abstrakter jedoch auch andere Mengen als sogenannten Grundkörper eines Vektorraums fordern.

[2]genauer: siehe Vektorraumaxiome im Baustein „Vektoren“.

[3]Sie kennen diese bereits aus der Schule. Wahrscheinlich jedoch unter dem Namen „Polynomfunktionen“.

[4]Es gibt noch sehr viel mehr Vektorräume. Ein anderer wichtiger Vertreten sind die Folgen.

Wir nennen eine Abbildung

$$V \times V \to \mathbb{R}$$

ein Skalarprodukt[a], wobei V einen reellen Vektorraum bezeichnet, wenn die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

1. **Bilinearität**
2. **Symmetrie**
3. **Positive Definitheit**

[a] auch **inneres Produkt** genannt

Sollte Sie also jemand fragen, worum es sich bei einem reellen Skalarprodukt handelt, können Sie einfach darauf antworten:„Ein reelles Skalarprodukt ist eine positiv definite, symmetrische Bilinearform.“. Nach einer solchen Antwort können zwei Fälle auftreten. Erstens die Person beendet das Gespräch und Sie sehen Sie nie wieder oder die Person sieht Sie fragend an und möchte wissen, was diese Worthüllen bedeuten. Auf die zweite Option wollen wir uns hier vorbereiten.

Die Definition besteht im Prinzip aus vier Teilen. Zuerst wird definiert, dass das Skalarprodukt eine Abbildung ist. Wichtig dabei ist zu verstehen, was die Formulierung $V \times V \to \mathbb{R}$ bedeutet. Der Pfeil repräsentiert die Abbildung. Eine Abbildung kann man sich als eine Maschine vorstellen, die aus vorhandenen Materialien etwas Neues produziert. Sie kennen Abbildung bereits aus der Schule, denn eine jede Funktion ist eine Abbildung. Einfach gesagt:„Sie stecken einen x-Wert hinein und bekommen einen y-Wert heraus“. Auf der linken Seite des Abbildungspfeils steht nun, was wir hineinstecken, auf der rechten Seite, was wir herausbekommen.
Beginnen wir mit der rechten Seite, da sie wesentlich einfacher zu verstehen ist. Sie sagt lediglich aus, dass wir in die reellen Zahlen abbilden. Anders ausgedrückt bedeutet das, dass wir eine Zahl (= Skalar) als Ergebnis der skalaren Multiplikation erhalten.
Die linke Seite gibt zuallererst einmal an, dass wir zwei Objekte in die Abbildung hineinwerfen müssen. Dies wird durch das Kreuz $\times$ symbolisiert. Diese zwei Objekte sind Elemente des Vektorraums V.
Die Schreibweise

$$\langle v, w \rangle$$

für das Skalarprodukt haben wir bereits im Baustein „Komplexe Vektoren und Indexnotation“ kennengelernt. Diese spezielle Art der Abbildung, das Skalarprodukt, muss nun drei Eigenschaften erfüllen, die wir im Folgenden diskutieren wollen

1. **Bilinearität:** bedeutet, dass die Linearitätsforderung sowohl für den linken (v), als auch für den rechten Eintrag (w) gelten muss.

2. **Symmetrie:** bedeutet, dass wir das linke und das rechte Element vertauschen dürfen. Es gilt: $\langle v, w\rangle = \langle w, v\rangle$.

3. **Positive Definitheit:** bezieht sich darauf, was passiert, wenn wir zwei gleiche Elemente verknüpfen. Dabei soll immer eine positive Zahl als Ergebnis resultieren. Null soll man nur dann erhalten, wenn das eingesetzte Element ebenfalls Null war. Den letzten Teil der Definition nennt man Definitheit.

Für das komplexe Skalarprodukt ändern wir die Definition ein wenig (Ü3).

Wir nennen eine Abbildung

$$V \times V \to \mathbb{C}$$

ein komplexes Skalarprodukt, wobei V einen komplexen Vektorraum bezeichnet, wenn die folgenden Eigenschaften erfüllt sind:

1. **Sesquilinear im erste und linear im zweiten Element**

2. **Hermitizität:** $\langle v, w\rangle = \langle w, v\rangle^*$

3. **Positive Definitheit**

Die ersten beiden Punkte haben sich augenscheinlich verändert. Damit einher geht allerdings eine weitaus wichtigere Veränderung. Beim komplexen Skalarprodukt müssen wir aufpassen, welches wir als erstes und welches wir als zweites Element verwenden. Für reelle Vektoren war das egal, da $\langle v, w\rangle = \langle v, w\rangle$ (Symmetrie) gilt.
Der erste Punkt beinhaltet auch ein neues Vokabel, nämlich **sesquilinear**. Es bedeutet:

$$\begin{aligned}
\langle v_1 + v_2, w\rangle &= \langle v_1, w\rangle + \langle v_2, w\rangle \\
\langle \lambda v, w\rangle &= \lambda^* \langle v, w\rangle \\
\langle v, \lambda w\rangle &= \lambda \langle v, w\rangle
\end{aligned}$$

Ziehen wir einen Skalar aus dem Skalarprodukt heraus, so müssen wir ihn komplex konjugieren, wenn er im ersten Element stand. Diese Definition ist üblich aber willkürlich. Man hätte diese „hässliche“ Eigenschaft auch dem zweiten Element zukommen lassen können.

Dualraum

Wir werden hier kurz auch auf den Bra-Ket-Formalismus vorgreifen, den wir im nächsten Baustein kennenlernen werden. Am komplexen Skalarprodukt sehen wir bereits, dass wir das linke und das rechte Element nicht mehr „einfach so" vertauschen dürfen. Man könnte auch sagen, dass das linke und das rechte Element verschiedene Rollen einnehmen.
Wir bezeichnen nun das linke Element durch den linken Teil der Klammer $\langle v|$ (Bra) und den rechten mit $|w\rangle$ (Ket). Nur wenn man einen Bra und einen Ket kombiniert erhält man eine Zahl. Per se sind die Bras und Kets gleichbedeutend - wir haben lediglich entschieden, dass das linke Element die unschönen Eigenschaften abbekommt.
Denken wir zurück an die komplexen Vektoren. Hier haben wir das Skalarprodukt auf folgende Art und Weise berechnet:

$$\langle v, w\rangle = v_1^* w_1 + v_2^* w_2 + v_3^* w_3 + \ldots$$

Überlegen Sie noch einmal, warum wir das so gemacht haben. Für die Berechnung dieses Skalarprodukts haben wir also den Vektor w mit dem komplex konjugierten des Vektors v kombiniert. Um also aus zwei gegebenen Vektoren das Skalarprodukt zu berechnen müssen wir das linke Element noch auf seinen Einsatz vorbereiten indem wir es komplex konjugieren[5]. Wir nennen alle diese abgeänderten Vektoren die dualen Vektoren zu den ursprünglichen. Der Raum, der aus allen diesen $v_i{=}w_i^*$ besteht wird **Dualraum** zum ursprünglichen Vektorraum der w_i genannt. Der Dualraum ist ebenfalls ein Vektorraum[6].
Wichtig ist zu erwähnen, dass der ursprüngliche Vektorraum weder schlechter noch besser als sein Dualraum ist. Die beiden sind gleichberechtigt. Sie spielen zusammen wie Männer und Frauen. Genauso wie hier nur aus der Kombination Mann und Frau ein Kind entstehen kann, kann nur aus der Kombination Dualvektor und Vektor ein Skalar entstehen.

3 Skalarprodukt für Polynome

Nun müssen wir uns überlegen was ein geeignetes Skalarprodukt für beispielsweise Polynome oder generell Funktionen ist. Dazu müssen wir die drei oben genannten Bedingungen erfüllen. Anstelle der Summe in den Ihnen bekannten Skalarprodukten bietet es sich an ein Integral zu verwenden.

[5] Da zweimaliges konjugieren zur ursprünglichen Zahl führt ist auch der Dualraum des Dualraumes der ursprüngliche Vektorraum.

[6] Insbesondere besitzt er auch eine Basis und es gelten alle Vektorraumaxiome. Man kann somit auch mit den duale Vektoren „ganz normal" rechnen.

Beim Integrieren kann im Gegensatz zur (endlichen) Summe etwas sehr unangenehmes passieren. Das Skalarprodukt sollte uns auch die Möglichkeit geben eine Norm zu definieren beziehungsweise Längen zu messen. Beim Integrieren kann es allerdings passieren, dass es Fälle gibt in denen wir als Ergebnis der Integration „∞“ erhalten. Daher müssen wir mit den Integrationsgrenzen etwas aufpassen. Es sollte auch klar sein, weshalb wir ein bestimmtes Integral benötigen - nur dieses liefert uns eine Zahl als Ergebnis.

Sehen wir uns das Beispiel aus dem ersten Kapitel dieses Bausteins an und überlegen uns, wie ein geeignetes Skalarprodukt für dieses aussieht. Wir haben dort die Polynome mit reellen Koeffizienten vom Grad 2 betrachtet (genauer gesagt vom Grad ≤ 2). Wir wollen das nachstehende Integral als Skalarprodukt verwende:

$$\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx$$

Nun überprüfen wir, ob dieses auch die drei oben genannten Bedingungen erfüllt.

1. **Symmetrie:** In diesem Fall bedeutet Symmetrie, dass wir zeigen müssen, dass

   $$\int_0^1 p(x)q(x)dx = \int_0^1 q(x)p(x)dx$$

   gilt. Wir können Polynome beim Multiplizieren vertauschen (Ü6) und daher gilt diese Forderung trivialerweise.

2. **Bilinearität:** Da wir bereits die Symmetrie gezeigt haben, genügt es zu zeigen, dass das Skalarprodukt entweder im ersten oder im zweiten Element linear ist (überlegen Sie sich warum). Wir entscheiden uns für das zweite Element und betrachten das Polynom $q(x) = cf(x)$, wobei auch $f(x)$ ein Polynom ist und $c \in \mathbb{R}$.

   $$\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx = \int_0^1 p(x)\left(c \cdot f(x)\right)dx = c\int_0^1 p(x)f(x)dx = c\,\langle p, f \rangle$$

   Hier haben wir lediglich verwendet, dass man Konstanten aus dem Integral herausziehen darf. Im zweiten Schritt unseres Beweises schreiben wir $q(x) = f(x) + g(x)$, wobei $f(x)$ und $g(x)$ wieder reell-wertige Polynome sein sollen.

   $$\langle p, q \rangle = \int_0^1 p(x)\left(f(x) + g(x)\right)dx = \int_0^1 p(x)f(x)dx + \int_0^1 p(x)g(x)dx =$$
   $$= \langle p, f \rangle + \langle p, g \rangle$$

   In diesem Schritt wurde verwendet, dass das Integral einer Summe aufgeteilt werden darf. Damit haben wir die Linearität und gemeinsam mit der Symmetrie auch die Bilinearität gezeigt.

3. **Positive Definitheit:** Die Definitheit zu überprüfen ist relativ einfach, denn man kann sich leicht darüber klar werden, dass

$$\langle p, p\rangle = 0 \Leftrightarrow p = 0$$

Dass $\langle p, p\rangle$ für $p \neq 0$ ein positives Ergebnis liefert erhält man aus folgender Überlegung

$$\langle p, p\rangle = \int_0^1 p(x)p(x)dx = \int_0^1 p^2(x)dx$$

Der Integrand $p^2(x)$ ist eine Funktion, die nur nicht-negative Funktionswerte annimmt. Das liegt daran, dass sie aus quadrierten Funktionswerten einer anderen Funktion entstanden ist. Somit ist auch die orientierte Fläche in den Grenzen von 0 bis 1 sicherlich positiv und genau das wollten wir zeigen.

Wir haben nun alle drei Bedingungen überprüft und somit haben wir einen weiteren Hilbertraum kennengelernt.

- Der Vektorraum der Polynome vom Grad ≤ 2 mit dem Skalarprodukt $\langle p, q\rangle = \int_0^1 p(x)q(x)dx$ ist ein Hilbertraum.

Möchte man dieses Konzept auf komplexe Funktionen erweitern und daher ein komplexes Skalarprodukt verwenden, so hat dieses üblicherweise die Form

$$\langle \psi, \varphi\rangle = \int_a^b \psi^*(x)\varphi(x)dx.$$

Dabei sind a und b Integrationsgrenzen, die auch $\pm\infty$ annehmen dürfen. Klarerweise müssen für ein solches komplexes Skalarprodukt die entsprechenden Eigenschaften gelten.

Übungsaufgaben

$$\left|\mathbb{C}^n\right\rangle$$

Ü1 Machen Sie sich klar, warum die Polynome vom Grad ≤ 2 einen Vektorraum bilden. Überprüfen Sie dies anhand der Vektorraumaxiome.

Ü2 Überlegen Sie welche Bedeutung die drei Forderungen in der Definition des Skalarprodukts auf das „Schul-Skalarprodukt“ von reellen Vektoren hat.

Ü3 Vergleichen Sie die Definitionen des reellen und des komplexen Skalarprodukts miteinander.

Ü4 Zeigen Sie, dass aus der Hermitizität des komplexen Skalarprodukts folgt, dass $\langle v, v\rangle \in \mathbb{R}$ ist.

Ü5 Überlegen Sie sich, dass beim Ersetzen aller komplexen Komponenten im komplexen Vektorraum mit komplexem Skalarprodukt durch reelle das komplexe Skalarprodukt die Eigenschaften des reellen Skalarprodukts erfüllt.

Ü6 Rechnen Sie anhand des nachstehenden Beispiels nach, dass die Multiplikation reeller Polynome kommutativ ist: $p(x) = 2x^2 + 5x + 1$, $q(x) = x^2 + x + 4$