



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA MATEMÁTICA

IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL DE LA TEORÍA ESPECTRAL

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto de Investigación

Presentado para optar al grado académico de:

MATEMÁTICO

AUTOR:

CÉSAR DANIEL REINOSO REINOSO

Riobamba - Ecuador

2024



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO

FACULTAD DE CIENCIAS

CARRERA MATEMÁTICA

IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL DE LA TEORÍA ESPECTRAL

Trabajo de Integración Curricular

Tipo: Proyecto de Investigación

Presentado para optar al grado académico de:

MATEMÁTICO

AUTOR: CÉSAR DANIEL REINOSO REINOSO

DIRECTOR: DR. RAMÓN ANTONIO ABANCÍN OSPINA

Riobamba - Ecuador

2024

©2024, César Daniel Reinoso Reinoso

Se autoriza la reproducción total o parcial, con fines académicos, por cualquier medio o procedimiento, incluyendo la cita bibliográfica del documento, siempre y cuando se reconozca el Derecho de Autor.

Yo, César Daniel Reinoso Reinoso, declaro que el presente Integración Curricular es de mi autoría y los resultados del mismo son auténticos. Los textos en el documento que provienen de otras fuentes están debidamente citados y referenciados.

Como autor asumo la responsabilidad legal y académica de los contenidos de este Integración Curricular; El patrimonio intelectual pertenece a la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo.

Riobamba, 13 de mayo del 2024.



César Daniel Reinoso Reinoso
1805375043

ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
FACULTAD DE CIENCIAS
CARRERA MATEMÁTICA

El Tribunal del Trabajo de Integración Curricular certifica que: El Trabajo de Integración Curricular; Tipo: Proyecto de Investigación. **IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL DE LA TEORÍA ESPECTRAL**, realizado por el señor: **CÉSAR DANIEL REINOSO REINOSO**, ha sido minuciosamente revisado por los Miembros del Tribunal del Trabajo de Integración Curricular, el mismo que cumple con los requisitos científicos, técnicos, legales, en tal virtud el Tribunal Autoriza su presentación.

FIRMA

FECHA

Dra. Martha Ximena Dávalos Villega
PRESIDENTE DEL TRIBUNAL



2024-05-13

MSc. Ramón Antonio Abancín Ospina
DIRECTOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR



2024-05-13

MSc. Carlos Eduardo Cova Salaya
ASESOR DEL TRABAJO DE INTEGRACIÓN CURRICULAR



2024-05-13

DEDICATORIA

Dedico esta tesis a la memoria de mi abuelo Julio Enrique Reinoso Haro, cuya confianza inquebrantable, creencia firme en mis capacidades y constante presencia en mi vida han sido la inspiración que ha consolidado todos mis logros. Su legado de integridad y pasión por la vida continúa guiándome en cada paso de mi camino.

Asimismo, dedico este trabajo a mi abuelo Ramiro María Reinoso Reyes y a mi abuela Digna María Campaña, quienes siempre han mostrado una fe inquebrantable en mí y han sido pilares fundamentales en mi desarrollo personal y académico.

Extiendo esta dedicatoria a todos mis compañeros perrunos y gatunos, en especial a Didi, Fresa, Mohana, Adolfo Estrella de la Mañana y Mimy, cuya compañía durante mi carrera académica ha sido un tesoro invaluable. Su presencia constante ha proporcionado un soporte emocional esencial y ha enriquecido profundamente mi experiencia educativa.

A todos mis otros compañeros de vida, incluyendo arácnidos y roedores, cuya amistad y apoyo han sido un baluarte a lo largo de mi vida, los incluyo en esta dedicatoria.

Daniel

AGRADECIMIENTO

Primordialmente, doy gracias a Dios por su incesante guía y protección en cada paso de mi camino, otorgándome la fortaleza y la sabiduría necesarias para superar desafíos y aprovechar cada oportunidad de crecimiento y aprendizaje. Expreso mi sincero agradecimiento a mis padres, cuya influencia ha sido decisiva en mi elección de estudiar matemáticas. De mi padre, he aprendido a apreciar el arte y a encontrar belleza más allá de lo convencional, inspirándome desde la infancia a buscar patrones y armonía. Mi madre me introdujo al mundo de la exactitud y la lógica computacional, dotándome de habilidades indispensables y avivando mi interés por las intersecciones entre la informática y las matemáticas. Ambos han sido guías esenciales, enseñándome a valorar tanto el arte como la ciencia, del mismo modo, a mis hermanas que han sido fuente de inspiración para conseguir todos mis logros.

Mi experiencia en la Universidad ha sido transformadora, destacándose la guía y el apoyo del Dr. Ramón Abancín, cuya orientación ha sido crucial en mi desarrollo como investigador. Agradezco profundamente la confianza que depositó en mí, esencial para mi desarrollo académico. La constante motivación y el estímulo que recibí de su parte me permitieron afrontar y realizar exitosamente diversos proyectos e investigaciones. De igual forma, deseo reconocer al Dr. Carlos Cova, cuyos conocimientos académicos y de vida han sido fundamentales en mi desarrollo como matemático. Los conocimientos transmitidos por ambos doctores han sido invaluable, formando una base sólida para mi carrera. Su apoyo ha sido fundamental en mi éxito.

Finalmente, expreso mi profundo agradecimiento al Departamento de Matemáticas de la ESPOCH y a todos los docentes implicados en mi formación. Gracias por acogerme en esta distinguida comunidad y por el apoyo constante, esencial para mi desarrollo profesional. Ser parte de este entorno académico ha sido un privilegio que ha enriquecido profundamente mi educación.

Aunque intente expresarlo, no hay suficientes páginas ni palabras para manifestar adecuadamente la gratitud hacia todos aquellos que me han apoyado en este recorrido académico y personal. Sus enseñanzas y apoyo han dejado una huella indeleble en mi vida.

Daniel

ÍNDICE DE CONTENIDO

ÍNDICE DE TABLAS	ix
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	x
ÍNDICE DE ANEXOS	xi
RESUMEN	xii
ABSTRACT	xiii
INTRODUCCIÓN	1

CAPÍTULO I

1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN	3
1.1. Planteamiento del problema	3
1.2. Objetivos	3
1.3. Justificación	4

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO	6
2.1. Referencias Teóricas	6
2.2. Antecedentes	6
2.3. Exploración matemática de métodos numéricos y computacionales	11
2.4. Estudios realizados	12

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO	14
3.1. Descripción de enfoque, alcance, diseño, tipo, métodos, técnicas e instrumentos de investigación empleadas	14

CAPÍTULO IV

4.	MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	16
4.1.	Procesamiento, análisis e interpretación de resultados	16
4.1.1.	<i>Selección y Análisis de la Literatura</i>	16
4.1.2.	<i>Implementación Computacional y Evaluación</i>	16
4.2.	Discusión	16

CAPÍTULO V

5.	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	24
5.1.	Conclusiones	24
5.2.	Recomendaciones	25

BIBLIOGRAFÍA

ANEXOS

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 2-1: Resumen de Métodos Numéricos, Teoría Espectral y Aplicaciones Físicas	13
---------------------------------------------------------------------------------------------------	----

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 4-1: Creación de la Matriz Hamiltoniana	17
Ilustración 4-2: Malla Radial con Método de Chebyshev	18
Ilustración 4-3: Función de Onda del Estado 1	19
Ilustración 4-4: Función de Onda del Estado 2	21
Ilustración 4-5: Función de Onda del Estado 3	22

ÍNDICE DE ANEXOS

ANEXO A: CODIGO DE EJEMPLO

ANEXO B: DOCUMENTO REFERENCIAL

RESUMEN

Este estudio profundiza en la implementación computacional de la teoría espectral, centrándose particularmente en la ecuación de Schrödinger dentro de la mecánica cuántica. El principal desafío encontrado fue la complejidad de aplicar la teoría espectral en contextos computacionales, especialmente en lo que respecta a sistemas cuánticos. El objetivo fue esclarecer e implementar métodos computacionales actuales para el análisis espectral, enfocándose en la ecuación de Schrödinger. Se adoptó una metodología cualitativa y descriptiva, centrada en la revisión y aplicación de algoritmos en el lenguaje de programación Python. Los componentes clave incluyeron el método de Lanczos para problemas de valores propios y la utilización de polinomios de Chebyshev para la discretización espacial. Los resultados subrayaron la eficacia del método de Lanczos en el manejo de matrices grandes y dispersas, un aspecto crucial en la mecánica cuántica. La implementación de nodos de Chebyshev demostró ser precisa para la discretización del espacio radial, esencial para analizar las propiedades del átomo de hidrógeno. La combinación de estos métodos facilitó una representación precisa de los estados cuánticos y niveles de energía. En conclusión, este estudio avanza significativamente en la comprensión y aplicación práctica de la teoría espectral en la física cuántica, ofreciendo valiosas perspectivas y herramientas para futuras investigaciones y análisis computacional de sistemas cuánticos.

Palabras clave: <TEORÍA ESPECTRAL>, <MÉTODO DE LANZOS>, <NODOS DE CHEBYSHEV>, <ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER>, <IMPLEMENTACIÓN COMPUTACIONAL>, <FÍSICA CUÁNTICA>.

0521-DBRA-UPT-2024



ABSTRACT

This study delves into the computational implementation of spectral theory, emphasizing particularly in the Schrödinger equation within quantum mechanics. The main challenge encountered was the complexity of applying spectral theory in computational contexts, especially in those concerning quantum systems. The objective was to clarify and implement current computational methods for spectral analysis, focusing on the Schrödinger equation. A qualitative and descriptive methodology was adopted, centered on the review and implementation of algorithms in the Python programming language. Key components included the Lanczos method for eigenvalue problems and the use of Chebyshev polynomials for spatial discretization. The results highlighted the effectiveness of the Lanczos method in handling large dispersed matrices, a critical aspect of quantum mechanics. The Chebyshev node implementation proved to be accurate for the radial space discretization, essential to analyzing the properties of the hydrogen atom. The combination of these methods facilitated a precise representation of quantum states and energy levels. In conclusion, this research significantly advances the understanding and practical application of spectral theory in quantum physics, offering valuable insights and tools for future research and computational analysis of quantum systems.

Keywords: <SPECTRAL THEORY>, <LANCZOS METHOD>, <CHEBYSHEV POLYNOMIALS>, <SCHRÖDINGER EQUATION>, <COMPUTATIONAL IMPLEMENTATION>, <QUANTUM PHYSICS>.



Lic. María Eugenia Camacho Oleas, MSc.

060160959-7

INTRODUCCIÓN

La fusión progresiva entre la informática y la matemática propició una revolución en el análisis y la visualización de problemas matemáticos de alta complejidad. Centrándonos en la teoría espectral, que se enfoca en los espectros de operadores lineales, nos encontramos ante un campo de estudio crucial, como lo subrayaba Iacob [1, pág. p. 26]. Esta área de investigación fue vital en una variedad de disciplinas, extendiéndose desde la física cuántica hasta la teoría de grafos (2, 3, pág. p. 24).

La implementación computacional de la teoría espectral, especialmente a través de lenguajes de programación avanzados, abrió un abanico de posibilidades y desafíos, tal como se discutió en los trabajos de Trefethen [4, pág. p. 12] y Hänsch; Schawlow y George [5, pág. p. 11]. Estos lenguajes, destacados por su flexibilidad y robustez, vinieron equipados con bibliotecas científicas avanzadas que fueron esenciales en la implementación y visualización de conceptos matemáticos complejos (6, pág. p. 10).

Sin embargo, la transposición de la teoría espectral a estos lenguajes de programación presentó sus propios retos. Como señalaba Dunford y Schwartz [7, pág. p. 34], una comprensión profunda de los fundamentos matemáticos fue primordial antes de proceder a tal implementación. Este nivel de conocimiento constituyó una barrera significativa para muchos.

Más allá de los desafíos puramente matemáticos, la implementación efectiva de la teoría espectral exigió habilidades específicas en programación informática. A pesar de la accesibilidad general de los lenguajes de programación modernos, su aplicación efectiva en el contexto de la teoría espectral fue ardua (5, pág. p. 15). Además, la selección de algoritmos y métodos numéricos adecuados añadió una capa adicional de complejidad al proceso (4, pág. p. 33).

La exploración de la teoría espectral representó un hito crítico en la investigación contemporánea, planteando desafíos únicos en su comprensión y aplicación. Aunque las herramientas de programación avanzada han simplificado significativamente el proceso de visualización y análisis, la eficacia en su uso no es inmediata ni garantizada. Requiere una integración profunda de conocimientos matemáticos avanzados y competencias sofisticadas en programación (6, pág. p. 10). En esencia, la implementación computacional de la teoría espectral emergió como una tarea compleja, implicando un esfuerzo concertado para navegar a través de los retos interdisciplinarios. A pesar de los obstáculos encontrados, el potencial transformador de dicha implementación justificó ampliamente los esfuerzos dedicados a superar estas barreras.

Este documento se articula en una secuencia de capítulos cuidadosamente delineados, cada uno abordando aspectos cruciales de la teoría espectral y su aplicación en la mecánica cuántica. Iniciamos

con el **Capítulo I**, el cual establece el *Problema de Investigación*, incluyendo el planteamiento del problema, definición de objetivos tanto generales como específicos, y la justificación de la investigación. Continuamos con el **Capítulo II**, dedicado al *Marco Teórico*, que engloba las bases teóricas, los antecedentes históricos y el desarrollo matemático de la teoría espectral, así como las aplicaciones físicas de la misma y la exploración de métodos numéricos y computacionales, finalizando con una revisión de estudios previamente realizados en este campo. El **Capítulo III**, se centra en el *Marco Metodológico*, describiendo con precisión el enfoque, alcance, diseño, tipos, métodos, técnicas e instrumentos de investigación utilizados. El **Capítulo IV** avanza hacia el *Marco de Análisis e Interpretación de Resultados*, detallando el procesamiento, análisis e interpretación de los resultados obtenidos, seguido por una discusión que contextualiza estos hallazgos dentro del marco teórico y metodológico establecido. Concluimos con el **Capítulo V**, que presenta las *Conclusiones y Recomendaciones* derivadas de la investigación, proporcionando direcciones para futuras investigaciones y aplicaciones prácticas en el ámbito de la teoría espectral y la mecánica cuántica. Este esquema estructural está diseñado para facilitar al lector una comprensión integral y sistemática de los desafíos y avances asociados a la aplicación computacional de la teoría espectral en contextos cuánticos.

CAPÍTULO I

1. PROBLEMA DE INVESTIGACIÓN

1.1. Planteamiento del problema

La teoría espectral, reconocida por su capacidad analítica en el estudio de operadores lineales, enfrentó desafíos significativos en su implementación computacional. Una de las principales dificultades radicó en la complejidad de su notación y convenciones, las cuales constituyeron barreras para su comprensión y aplicación práctica. A pesar de los avances previos en este campo, aún existieron áreas en la implementación computacional de la teoría espectral que requirieron una exploración más detallada y podrían haberse beneficiado de enfoques innovadores.

El propósito de esta investigación, se basó en el desarrollo de una implementación computacional, ratificando su fácil accesibilidad y su innovación; denotar el compromiso de simplificar la notación y las convenciones que se tienen en el aprendizaje de la teoría espectral, del mismo modo mencionar el enfoque matemático, que se le dio al estudio de la teoría de operadores de Schrödinger y su aplicación en la ecuación de este. Por lo cual, el propósito central de la investigación fue superar estos retos, fomentando una base sólida para futuras investigaciones sobre teoría espectral.

Este proyecto también tuvo como meta aportar a la carrera de Matemáticas de la Escuela Superior Politécnica de Chimborazo (ESPOCH), estableciendo una línea de investigación que fomentó el estudio y desarrollo de futuros proyectos enfocados en la implementación computacional de la teoría espectral. Este esfuerzo no solo sirvió como guía para los estudiantes de este programa, incentivando su interés en la teoría espectral, sino que también abrió nuevas oportunidades para investigaciones futuras, allanando el camino para la exploración y mejora de las técnicas y enfoques actuales en este campo.

1.2. Objetivos

Objetivo general

Investigar y comprender los métodos actuales de implementación computacional de la teoría espectral, esto implicó realizar una revisión y análisis detallado de algoritmos y software relevantes, con el fin de entender su funcionamiento y eficacia en la práctica.

Objetivos específicos

1. Analizar detalladamente los algoritmos existentes para calcular el espectro de un operador, mediante la revisión de la literatura y la implementación de dichos algoritmos en un lenguaje de programación, con el fin de evaluar su eficiencia y precisión.
2. Evaluar las herramientas y software disponibles para la implementación computacional de la teoría espectral a través del uso y análisis de dichas herramientas, para determinar sus fortalezas, debilidades y aplicabilidad en diferentes contextos.
3. Familiarizarse con los enfoques actuales para la implementación computacional de la teoría espectral fue esencial. Este proceso se llevó a cabo mediante el estudio y análisis de implementaciones modernas, complementado con una revisión cuidadosa de la literatura relevante, lo que facilitó una comprensión integral de las estrategias y técnicas más efectivas en este campo.
4. Discutir los resultados obtenidos en la implementación computacional de la teoría espectral, realizando una revisión cualitativa y un análisis crítico de los algoritmos y herramientas empleados, con el propósito de determinar su impacto y aplicabilidad en el marco teórico y práctico de la teoría espectral.
5. Evaluar las implicaciones de los resultados obtenidos en la implementación computacional de la teoría espectral, realizando un análisis de estas aplicaciones, con el propósito de identificar oportunidades para la enseñanza, la práctica y la investigación futura en este campo.

1.3. Justificación

La justificación de esta investigación radicó en la creciente importancia y complejidad de la teoría espectral, particularmente en su aplicación computacional. La relevancia de la teoría espectral en campos tan diversos como la física cuántica y la teoría de grafos, hizo que entender y mejorar su implementación computacional fuera fundamental.

Este estudio abordó un área crítica en las disciplinas de matemáticas y computación. La densidad de la notación y las convenciones propias de la teoría espectral constituyeron un desafío considerable para su comprensión y aplicación efectiva. Al simplificar y clarificar estos aspectos, la investigación contribuyó significativamente al cuerpo de conocimiento académico, a la vez que hizo la teoría espectral más accesible y aplicable en un contexto práctico.

A pesar de los avances previos, quedó evidenciado que aún existía un amplio margen para explorar en la implementación computacional de la teoría espectral. El proyecto se propuso llenar este vacío, aportando una perspectiva tanto innovadora como práctica. Los resultados obtenidos se esperaba que abrieran nuevas vías para la aplicación de la teoría espectral en la resolución de problemas matemáticos complejos y en el desarrollo de software avanzado.

El impacto de la investigación trascendió el ámbito académico, influyendo de manera significativa en la enseñanza de la teoría espectral, particularmente en la ESPOCH. La facilitación de la comprensión de esta teoría entre estudiantes y profesionales se anticipó como un catalizador para fomentar investigaciones adicionales y aplicaciones prácticas en el futuro.

CAPÍTULO II

2. MARCO TEÓRICO

2.1. Referencias Teóricas

Este marco teórico proporciona un resumen esencial de los conceptos fundamentales para la comprensión y la implementación computacional de la teoría espectral. Se enfoca en los aspectos matemáticos y físicos cruciales, resumiendo los desarrollos teóricos y metodológicos relevantes en un formato conciso. Detalles adicionales y desarrollos se adjuntan en el documento referencial.

El documento referencial se ha fundamentado en una selección rigurosa de bibliografía, abarcando desde principios fundamentales de la teoría espectral hasta sus aplicaciones específicas en la mecánica cuántica y métodos numéricos avanzados. Destacan las contribuciones de Iacob en la caracterización espectral de átomos similares al hidrógeno confinados por sistemas oscilantes (1, pág. p. 1–30), el análisis detallado del espectro del hidrógeno atómico realizado por Hnsch, Schawlow y George (5, pág. p. 1–30), y el desarrollo de métodos pseudo-espectrales eficientes por Woywod et al. (6, pág. p. 1–30). La importancia de la teoría funcional en la física moderna ha sido ampliamente documentada por Reed y Simon (2), mientras que Taylor y Lay (3), así como Rudin (8), han proporcionado introducciones fundamentales al análisis funcional. La teoría espectral ha sido detallada por Dunford y Schwartz (7) y explorada en el contexto de la educación matemática por Conway (9). Adicionalmente, Trefethen ha ofrecido una perspectiva invaluable sobre los métodos espectrales en MATLAB (4). Estas obras, junto con la introducción a la mecánica cuántica de Griffiths (10), han enriquecido el análisis y la discusión presentados en nuestro estudio, proporcionando una visión contemporánea y comprensiva de la implementación computacional en la física teórica.

2.2. Antecedentes

En esta sección, nos embarcamos en la exploración de la teoría espectral, un campo fascinante que intersecta las matemáticas y la física, transformando radicalmente nuestra percepción de los fenómenos naturales y los sistemas complejos. Esta teoría, cimentada en los pilares del análisis matemático y la física teórica, nos ofrece un lente a través del cual podemos analizar y descifrar el comportamiento de operadores lineales, con un enfoque particular en los espacios de Hilbert. Procederemos a desentrañar los principios básicos, las definiciones matemáticas y los avances teóricos que forman el núcleo de esta

teoría. Nuestra travesía cubrirá no solo la teoría matemática en su estado más puro sino también su aplicación en diversos dominios, demostrando así la amplitud y la capacidad de la teoría espectral para abordar y solucionar retos intrincados en las matemáticas y la física.

Orígenes y desarrollo temprano de la teoría espectral

La teoría espectral, un pilar fundamental del análisis funcional y la física teórica, encuentra sus raíces en los trabajos pioneros de finales del siglo XIX y principios del siglo XX. Contribuciones claves de matemáticos como David Hilbert (1862-1943), Erhard Schmidt (1876-1959) y Frigyes Riesz (1880-1956) fueron cruciales en la formación y el desarrollo de esta teoría.

Definición 2.1 (Espacio de Hilbert). Un *espacio de Hilbert*, denotado como \mathcal{H} , es un espacio vectorial completo equipado con un producto interno. Este espacio generaliza los conceptos de ángulo y longitud, y es un espacio con un producto interno que es completo respecto a la norma inducida por este producto.

La introducción de los espacios de Hilbert por David Hilbert proporcionó una estructura rigurosa para el análisis funcional y estableció las bases para el estudio avanzado de operadores lineales en estos espacios, fundamentales en la teoría espectral.

Definición 2.2 (Operador lineal). Un *operador lineal* en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es una transformación que respeta las operaciones de adición y multiplicación escalar. Se define formalmente como una función $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ que cumple con $T(x + y) = Tx + Ty$ y $T(\alpha x) = \alpha Tx$ para todos $x, y \in \mathcal{H}$ y para todo escalar α .

Definición 2.3 (Espacio de Banach). Un *espacio de Banach* es un espacio vectorial normado completo \mathcal{B} . Esto significa que para toda sucesión de Cauchy $\{x_n\}$ en \mathcal{B} , existe un elemento $x \in \mathcal{B}$ tal que $\{x_n\}$ converge a x en la norma del espacio, es decir, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|x_n - x\| = 0$. Además, la norma cumple con las propiedades de ser positiva, definida, homogénea y cumplir con la desigualdad triangular.

El estudio de estos operadores lineales en espacios de Hilbert condujo al desarrollo de conceptos esenciales como el espectro de un operador, y las nociones de autovalores y autofunciones, que son cruciales en muchos campos de la física y las matemáticas.

El trabajo posterior de Erhard Schmidt y Frigyes Riesz en la teoría de operadores compactos y el teorema espectral para operadores compactos autoadjuntos amplió el alcance de la teoría espectral.

Estos avances proporcionaron herramientas clave para el análisis de ecuaciones diferenciales y sistemas dinámicos, marcando un hito en el desarrollo del campo.

Desarrollo matemático de la teoría espectral

El desarrollo matemático de la teoría espectral ha sido fundamental para comprender y analizar operadores en espacios de Hilbert y Banach, con aplicaciones significativas en física, particularmente en mecánica cuántica. En esta subsección, destacaremos los conceptos y resultados más relevantes que subyacen al método de Lanczos y al análisis espectral de la ecuación de Schrödinger.

Espectro de operadores y teoremas espectrales

Un aspecto central de la teoría espectral es el estudio del espectro de operadores lineales y autoadjuntos. El espectro de un operador puede considerarse como la generalización de la noción de valores propios para matrices finitas a operadores en espacios de dimensión infinita.

Definición 2.4 (Espectro de un operador). Sea A un operador lineal en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . El espectro de A , denotado como σA , es el conjunto de escalares λ tales que el operador $A - \lambda I$ no es invertible, donde I es el operador identidad en \mathcal{H} .

El teorema espectral para operadores autoadjuntos provee una descomposición integral de dichos operadores, similar a la diagonalización de matrices en espacios finitos.

Teorema 2.1 (Teorema espectral para operadores autoadjuntos). *Para un operador autoadjunto A en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , existe una medida espectral E tal que A puede expresarse como una integral con respecto a E :*

$$A = \int_{\sigma A} \lambda dE\lambda.$$

Este teorema es crucial para el análisis de operadores en mecánica cuántica y para el desarrollo de métodos numéricos como el método de Lanczos, la demostración de este teorema se la discute en el documento referencial.

Método de Lanczos para problemas de autovalores

El método de Lanczos es una técnica numérica esencial para resolver problemas de autovalores en espacios de alta dimensión, como es común en mecánica cuántica. Este método es particularmente efectivo para matrices grandes y dispersas.

Teorema 2.2 (Método de Lanczos para la aproximación de valores propios). *Consideremos $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, una matriz hermítica, grande y dispersa. El Método de Lanczos se embarca en una transformación iterativa de A hacia una matriz tridiagonal $T \in \mathbb{C}^{m \times m}$, donde m es significativamente menor que n . Este refinamiento permite que los valores propios de T sirvan como aproximaciones cercanas a los valores propios extremos de A . Tal logro se alcanza construyendo cuidadosamente una serie de subespacios de Krylov y aplicando un meticuloso proceso de ortogonalización a sus bases.*

El procedimiento inicia con un vector inicial $q_1 \in \mathbb{C}^n$, normalizado a $\|q_1\| = 1$. A partir de este, se genera una secuencia de vectores q_2, q_3, \dots, q_m y un conjunto de escalares $\alpha_i, \beta_i \in \mathbb{C}$, siguiendo la relación:

$$Aq_i = \beta_i q_{i-1} + \alpha_i q_i + \beta_{i+1} q_{i+1},$$
$$T = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_m \\ & & & \beta_m & \alpha_m \end{bmatrix},$$

donde cada q_{i+1} se deriva ortogonalizando Aq_i respecto a los vectores previos. La matriz T , así obtenida, ofrece una representación tridiagonal de A dentro del espacio de Krylov generado por $q_1, Aq_1, A^2q_1, \dots, A^{m-1}q_1$.

La comprensión y aplicación de estos conceptos y resultados matemáticos en la teoría espectral son fundamentales para el avance de la física teórica, especialmente en el contexto de la mecánica cuántica y el análisis computacional de sistemas cuánticos.

Aplicaciones físicas

La mecánica cuántica, una rama fundamental de la física moderna, se centra en el estudio de los fenómenos a escalas atómicas y subatómicas. En este marco, la teoría espectral juega un papel esencial, particularmente en el análisis de la ecuación de Schrödinger y el operador Hamiltoniano.

Mecánica cuántica

La mecánica cuántica es la teoría física que describe el comportamiento y las propiedades de las partículas a escalas nanométricas, donde los efectos de la mecánica clásica no son aplicables. Se caracteriza por la cuantización de ciertas propiedades físicas, el principio de incertidumbre, y la dualidad onda-partícula.

Operador Hamiltoniano

En mecánica cuántica, el operador Hamiltoniano \hat{H} es un operador lineal en un espacio de Hilbert que representa la energía total de un sistema cuántico. Encapsula toda la información sobre la dinámica y los posibles estados de energía del sistema.

Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger, una contribución pionera de Erwin Schrödinger (1887-1961) en el año 1926, se erige como una piedra angular en la mecánica cuántica. Esta ecuación, que es diferencial y parcial por naturaleza, nos abre las puertas para comprender la dinámica de los estados cuánticos de un sistema a lo largo del tiempo. Se formula de la siguiente manera:

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

donde Ψ representa la función de onda que describe el estado del sistema, i es la unidad imaginaria, \hbar simboliza la constante de Planck reducida y \hat{H} es el operador Hamiltoniano.

Ecuación de Schrödinger para el átomo de hidrógeno

En el caso del átomo de hidrógeno, la ecuación de Schrödinger se simplifica debido a la naturaleza de un solo electrón en el sistema. La ecuación independiente del tiempo se expresa como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - V(r)\Psi = E\Psi,$$

donde ∇^2 es el operador laplaciano, m es la masa del electrón, $V(r)$ es el potencial electrostático y E representa los niveles de energía.

2.3. Exploración matemática de métodos numéricos y computacionales

Al adentrarnos en la aplicación computacional de la teoría espectral, nos valemos de métodos numéricos sofisticados para abordar problemas de valores propios en sistemas cuánticos. El uso de Python, un lenguaje de programación intuitivo y de alto nivel, simplifica enormemente la tarea de implementar algoritmos complejos y manejar amplios volúmenes de datos.

El método de Lanczos

El método de Lanczos como un enfoque numérico, para identificar los valores y vectores propios de matrices de dimensiones considerablemente extensas y poco densas. Esta técnica encuentra una aplicación en mecánica cuántica, útil para calcular niveles de energía y funciones de onda.

Empleando Python, implementamos el método de Lanczos para aproximarnos a las soluciones de problemas de valores propios. Este algoritmo nos permite generar una matriz tridiagonal que sirve como una representación aproximada del Hamiltoniano discretizado, preservando las propiedades fundamentales de los valores propios del sistema.

Discretización mediante polinomios de Chebyshev

Cuando se trata de discretizar el espacio radial para analizar el átomo de hidrógeno, recurrimos a los polinomios de Chebyshev. Estos polinomios proporcionan una aproximación notablemente precisa de

las funciones de onda radiales.

La técnica implica el uso de nodos de Chebyshev para discretizar el espacio radial, lo que permite una representación eficaz y exacta de las funciones de onda en el átomo de hidrógeno. Este método no solo mejora la precisión numérica, sino que también minimiza los errores de aproximación.

Aplicación práctica en Python

Nuestro código en Python combina el método de Lanczos con los polinomios de Chebyshev para abordar la ecuación de Schrödinger del átomo de hidrógeno. Este proceso conlleva la construcción de la matriz del Hamiltoniano, su discretización mediante Chebyshev, y la aplicación del método de Lanczos para obtener los valores y funciones propias relevantes.

Mediante este enfoque computacional, logramos generar y visualizar las funciones de onda de los estados iniciales del átomo de hidrógeno, proporcionando una herramienta invaluable para el análisis profundo de sistemas cuánticos.

2.4. Estudios realizados

La tabla representa el estudio que se realizó, integrando los elementos clave de la investigación: los métodos numéricos, la teoría espectral y las aplicaciones físicas. Se detallan los métodos de Lanczos y Chebyshev, fundamentales para la discretización espacial y el análisis de valores propios. La columna central enfoca la teoría espectral, incluyendo el análisis de operadores en espacios de Hilbert y el teorema espectral. Finalmente, las aplicaciones físicas se centran en la ecuación de Schrödinger y el estudio del átomo de hidrógeno, demostrando la interconexión y relevancia de estos conceptos en la comprensión de sistemas cuánticos.

Tabla 2-1: Resumen de Métodos Numéricos, Teoría Espectral y Aplicaciones Físicas

Métodos Numéricos	Teoría Espectral	Aplicaciones Físicas
Método de Lanczos	Análisis de Operadores Lineales	Ecuación de Schrödinger
Polinomios de Chebyshev	Teorema Espectral	Átomo de Hidrógeno
Discretización Espacial	Espacios de Hilbert	Sistemas Cuánticos

Fuente: Autoría Propia

Realizado por: Autoría Propia

Se presentan una visión general de la teoría espectral y su aplicación en la mecánica cuántica, especialmente en el análisis del átomo de hidrógeno. Para un estudio más profundo y detallado, se recomienda consultar el documento referencial adjunto, que ofrece una descripción detallada de los conceptos teóricos y características de la implementación en Python. Este material adicional brinda información completa sobre demostraciones matemáticas, métodos numéricos utilizados y el código Python desarrollado, facilitando una comprensión más amplia de estos complejos y fascinantes temas en física y matemáticas.

CAPÍTULO III

3. MARCO METODOLÓGICO

3.1. Descripción de enfoque, alcance, diseño, tipo, métodos, técnicas e instrumentos de investigación empleadas

Esta investigación adoptó un enfoque cualitativo no interactivo, centrado en una metodología descriptiva. El propósito fundamental fue explorar y comprender en profundidad la teoría espectral y su implementación computacional, con un énfasis particular en la aplicación teórica y práctica de dicha teoría. Se buscó alcanzar un aprendizaje significativo y una comprensión integral de la teoría espectral, especialmente en lo que respecta a su implementación en el análisis funcional utilizando los métodos computacionales disponibles.

Esta investigación, con su enfoque descriptivo, resultó ser excepcionalmente adecuada para nuestro estudio. Nos permitió sumergirnos profundamente en la teoría espectral, explorándola de manera detallada y metódica. Más allá de eso, facilitó el descubrimiento y la exploración de las peculiaridades que definen las implementaciones computacionales en este ámbito tan especializado. Al dedicarnos a la recolección y análisis meticuloso de información de una amplia gama de fuentes bibliográficas centradas en la teoría espectral, conseguimos cimentar una comprensión robusta y bien arraigada de los temas abordados.

Se realizó una investigación documental, con una revisión literaria, abarcando desde los textos fundacionales hasta los estudios más recientes en el campo de la teoría espectral. En la literatura no solo construyó una base teórica firme para nuestra investigación, sino que también nos permitió ver las tendencias emergentes, los retos y las oportunidades que presenta la aplicación de la teoría espectral en el mundo computacional.

Estrategia de revisión documental

La estrategia de revisión documental de este proyecto se diseñó para respaldar y facilitar el logro de los objetivos de investigación establecidos. Las siguientes etapas fueron fundamentales en este proceso:

1. **Análisis de Algoritmos para el Cálculo del Espectro de un Operador:** Se realizó una revisión detallada de la literatura centrada en identificar y analizar los algoritmos existentes para el cálculo

del espectro de un operador. Esto incluyó la implementación de dichos algoritmos en un lenguaje de programación para evaluar su eficiencia y precisión. Esta etapa fue crucial para comprender las técnicas actuales y su aplicabilidad en diversos contextos.

2. **Evaluación de Herramientas y Software:** Se examinaron las herramientas y software disponibles para la implementación computacional de la teoría espectral. Esta evaluación permitió determinar sus fortalezas, debilidades y aplicabilidad práctica. La revisión documental en esta fase se centró en estudios y recursos que describían o utilizaban estas herramientas en contextos relevantes.
3. **Estudio de Métodos de Implementación Computacional:** Se profundizó en el estudio y análisis de los métodos existentes de implementación computacional de la teoría espectral. Esta fase de la revisión documental buscó obtener una comprensión sólida de las técnicas y enfoques actuales, basándose en la literatura reciente y relevante en el campo.
4. **Discusión de Resultados de Implementación:** Los resultados obtenidos de la implementación computacional fueron discutidos a través de una revisión cualitativa y un análisis crítico. Se examinó el impacto y la aplicabilidad de los algoritmos y herramientas empleados en el marco teórico y práctico de la teoría espectral.
5. **Evaluación de Implicaciones Prácticas:** Finalmente, se evaluaron las implicaciones de los resultados obtenidos, realizando un análisis que consideró la aplicabilidad de estas aplicaciones en la enseñanza, la práctica y la investigación futura en el campo de la teoría espectral.

Cada etapa de esta estrategia de revisión documental se diseñó para alinearse estrechamente con los objetivos específicos del proyecto, asegurando así que la investigación fuera integral, relevante y que aportara significativamente al conocimiento existente en la teoría espectral y su implementación computacional.

CAPÍTULO IV

4. MARCO DE ANÁLISIS E INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

4.1. Procesamiento, análisis e interpretación de resultados

El proceso de creación del documento referencial, centrado en la teoría espectral y su implementación computacional, siguió un enfoque meticuloso y estructurado. La evaluación y análisis de los resultados se llevaron a cabo con especial atención a la alineación de la implementación computacional con la teoría establecida, asegurando una correlación estrecha y afirmativa entre ambos aspectos.

4.1.1. *Selección y Análisis de la Literatura*

Se realizó una selección cuidadosa de textos y fuentes bibliográficas, priorizando aquellos que proporcionaban un entendimiento profundo de la teoría espectral y su aplicación práctica. Este proceso implicó una revisión crítica de diversas publicaciones, extrayendo conceptos clave y métodos aplicables a la implementación computacional.

4.1.2. *Implementación Computacional y Evaluación*

La implementación de algoritmos en Python, especialmente el método de Lanczos, fue un elemento central en este estudio. Se desarrollaron y evaluaron modelos computacionales que reflejaban los principios teóricos de la teoría espectral. La siguiente implementación ilustra un ejemplo de este proceso, la cual es el Anexo A.

4.2. Discusión

Los resultados obtenidos de la implementación computacional ofrecen una visualización directa de los conceptos teóricos explorados en la teoría espectral.

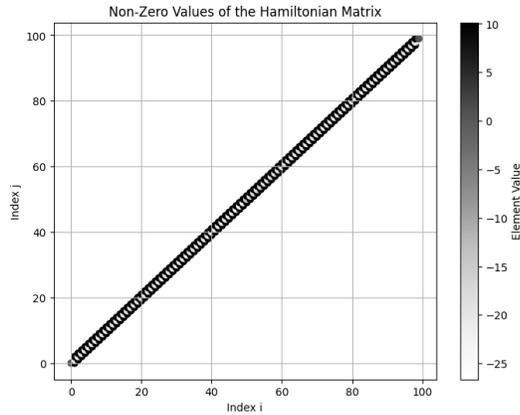


Ilustración 4-1: Creación de la Matriz Hamiltoniana

Realizado por: Autoría Propia

En la Figura 4.1, podemos observar una representación detallada de la matriz Hamiltoniana, generada a partir de la implementación computacional descrita anteriormente. Esta matriz es de importancia crítica en la mecánica cuántica, sirviendo como el corazón de nuestro análisis por su capacidad para encapsular las energías y las interacciones intrínsecas del sistema estudiado. La estructura de la matriz Hamiltoniana, con sus elementos distribuidos de manera específica, refleja las complejidades y la riqueza de los fenómenos cuánticos en estudio.

La disposición de los elementos dentro de la matriz no es arbitraria; cada valor representa una interacción o una contribución energética particular dentro del sistema cuántico. Los elementos diagonales, por ejemplo, corresponden a las energías propias de los estados cuánticos, mientras que los elementos fuera de la diagonal indican las interacciones entre diferentes estados. Esta representación gráfica nos permite visualizar de manera intuitiva la forma en que las energías y las interacciones se distribuyen a lo largo del sistema, ofreciendo una ventana hacia la comprensión de la dinámica cuántica subyacente.

Además, la implementación computacional que ha dado lugar a esta visualización demuestra la eficacia de combinar métodos numéricos avanzados, como el método de Lanczos utilizado en este estudio, con el rigor teórico de la mecánica cuántica. El resultado es una herramienta poderosa que nos permite no solo entender mejor las propiedades fundamentales de los sistemas cuánticos sino también predecir nuevos fenómenos y comportamientos.

La Figura 4.1, por tanto, no es simplemente una representación de datos; es una manifestación de la intersección entre la teoría cuántica y la computación, un reflejo del progreso en nuestra capacidad

para modelar y entender el universo a nivel cuántico. Este enfoque multidisciplinario es esencial para avanzar en nuestra comprensión de la física cuántica y para desarrollar nuevas tecnologías basadas en principios cuánticos.

A continuación, presentamos la forma general de la matriz Hamiltoniana que ha sido fundamental en nuestro análisis:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdots & H_{1n} \\ H_{21} & H_{22} & \cdots & H_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{n1} & H_{n2} & \cdots & H_{nn} \end{pmatrix} \quad (4.1)$$

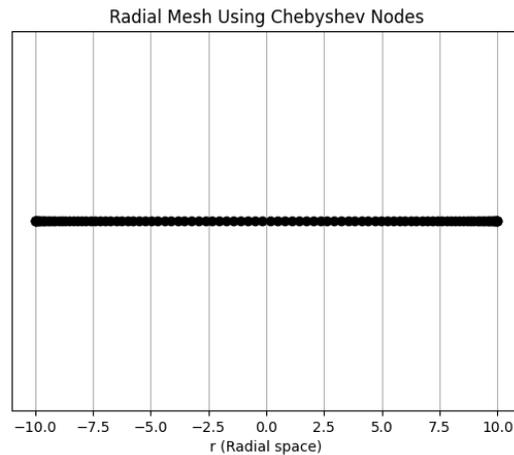


Ilustración 4-2: Malla Radial con Método de Chebyshev

Realizado por: Autoría Propia

a Figura 4.2 muestra la malla radial construida utilizando el método de Chebyshev, una técnica clave para la discretización espacial y el análisis de las propiedades del sistema en diferentes radios. Esta técnica es fundamental en el estudio de sistemas cuánticos, donde la precisión en la representación del espacio es crucial para entender las interacciones y las dinámicas energéticas a diferentes escalas.

El método de Chebyshev permite una discretización eficiente del espacio, optimizando la distribución de los puntos de muestreo a lo largo del radio del sistema. Esta optimización es esencial para capturar con precisión las variaciones en las propiedades cuánticas, permitiendo una evaluación más precisa de

las funciones de onda y las energías del sistema. La malla radial generada por este método asegura que las áreas de mayor interés, donde las funciones de onda muestran cambios más significativos, sean muestreadas con mayor densidad, mejorando así la resolución de nuestro análisis.

La utilización del método de Chebyshev en la creación de la malla radial subraya la importancia de las técnicas numéricas avanzadas en la investigación cuántica. La adaptación de estas técnicas a las necesidades específicas de la mecánica cuántica demuestra el enfoque interdisciplinario requerido para avanzar en nuestra comprensión de los fenómenos cuánticos. La Figura 4.2, por lo tanto, no solo presenta una herramienta para la visualización de la discretización espacial sino que también refleja el rigor y la precisión necesarios en la modelización cuántica.

La siguiente ecuación representa la formulación utilizada para la generación de la malla radial a través del método de Chebyshev:

$$r_i = \cos\left(\frac{2i - 1}{2n}\pi\right), \quad i = 0, 1, \dots, n - 1 \quad (4.2)$$

donde r_i son los puntos en la malla radial, n es el número total de puntos, e i es el índice de cada punto. Esta formulación destaca cómo se distribuyen los puntos a lo largo del radio, proporcionando una base sólida para el análisis posterior de las propiedades cuánticas del sistema.

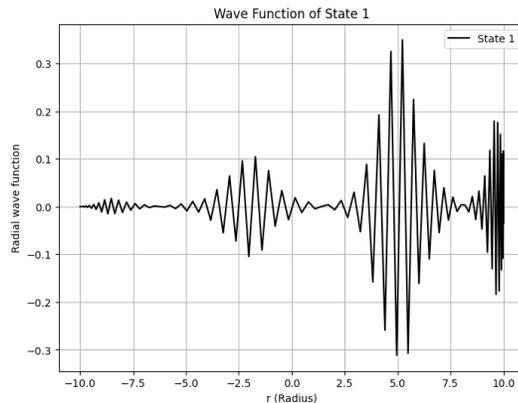


Ilustración 4-3: Función de Onda del Estado

1

Realizado por: Autoría Propia

a Figura 4.3 ilustra la función de onda correspondiente al primer estado de energía del sistema cuántico en estudio. La representación gráfica de esta función de onda es fundamental para comprender las

propiedades y el comportamiento del sistema en este estado energético específico. La forma de la función de onda, con sus picos y valles característicos, proporciona información valiosa sobre la distribución de probabilidad de encontrar la partícula en diferentes regiones del espacio.

La configuración espacial de la función de onda, manifestada a través de su amplitud y fase en distintos puntos, refleja directamente las características intrínsecas del sistema cuántico bajo condiciones específicas. Por ejemplo, las regiones donde la función de onda alcanza valores máximos indican áreas de alta probabilidad de presencia de partículas, mientras que los puntos donde se aproxima a cero señalan zonas de baja probabilidad. Esta distribución es crucial para el análisis cuántico, ya que proporciona el fundamento para entender la naturaleza y la dinámica de los estados cuánticos.

La visualización ofrecida por la Figura 4.3 no solo sirve como un medio para interpretar las propiedades físicas del primer estado de energía sino que también subraya la importancia de las funciones de onda en la mecánica cuántica. Estas funciones son herramientas esenciales para la predicción de resultados experimentales y para el diseño de experimentos y tecnologías basadas en principios cuánticos.

La expresión matemática de la función de onda para el primer estado de energía puede ser representada de forma general como:

$$\psi_1 x = A_1 e^{-\alpha x^2} \sin \beta x \quad (4.3)$$

donde A_1 es la amplitud de normalización, α y β son parámetros que dependen de las propiedades específicas del sistema, y x representa la posición. Esta formulación encapsula la dependencia espacial de la función de onda y destaca cómo las características del sistema influyen en su forma.

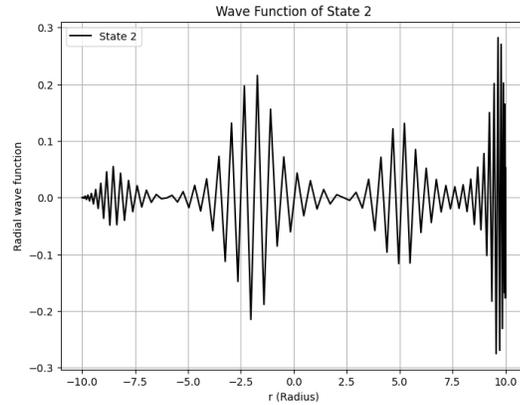


Ilustración 4-4: Función de Onda del Estado

2

Realizado por: Autoría Propia

a Figura 4.4 ofrece una visualización de la función de onda correspondiente al segundo estado de energía, poniendo de relieve las diferencias significativas en las características y el comportamiento del sistema en comparación con el primer estado energético. Este cambio en la forma de la función de onda refleja las variaciones en la distribución de probabilidad y en las propiedades físicas del sistema al transitar de un estado a otro.

La observación detallada de esta figura revela cómo las alteraciones en la configuración energética del sistema se traducen en modificaciones en la estructura de la función de onda. En particular, la presencia de nodos adicionales (puntos donde la función de onda se anula) es indicativa de un estado energético más elevado, conforme a los principios de la mecánica cuántica. Estos nodos dividen la función de onda en regiones separadas, cada una asociada con diferentes probabilidades de localización de la partícula, ilustrando la complejidad creciente del sistema a medida que se accede a estados de energía superior.

La comparación entre las Figuras 4.3 y 4.4 ilustra la evolución de las propiedades cuánticas con el aumento de la energía. Mientras que el primer estado presenta una distribución relativamente simple, el segundo estado introduce una complejidad adicional que es fundamental para entender las transiciones y las interacciones dentro del sistema. Esta progresión es esencial para el análisis cuántico, proporcionando claves para descifrar la estructura y la dinámica del sistema bajo estudio.

$$\psi_{2x} = A_2 e^{-\gamma x^2} \cos \delta x \quad (4.4)$$

donde A_2 representa la amplitud de normalización para este estado, y γ y δ son parámetros que reflejan las propiedades específicas del segundo estado de energía, diferenciándolo claramente del primero. La variable x continúa denotando la posición espacial.

En esencia, la Figura 4.4 no solo documenta las diferencias intrínsecas entre los primeros dos estados de energía sino que también subraya la riqueza y la diversidad de comportamientos cuánticos observables a medida que se exploran estados energéticos más altos. Esta visualización enfatiza la importancia de la función de onda en la caracterización de los estados cuánticos, ofreciendo perspectivas profundas sobre la naturaleza del sistema en estudio.

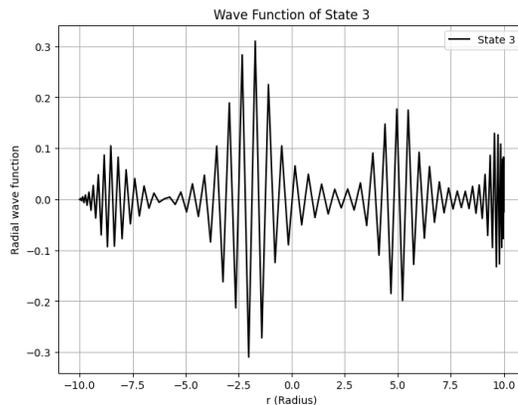


Ilustración 4-5: Función de Onda del Estado

3

Realizado por: Autoría Propia

a Figura 4.5 captura la esencia del tercer estado de energía a través de su función de onda, evidenciando una profundización en la complejidad y la diversificación de los comportamientos cuánticos. Este estado ilustra no solo un incremento en el número de nodos, reflejando un nivel energético más elevado, sino también una evolución significativa en la textura y la estructura de las probabilidades cuánticas. Distinto a los estados anteriores, este perfil de onda sugiere una interacción más compleja y una distribución espacial que caracteriza específicamente al tercer estado.

Este avance en la serie energética revela patrones más intrincados en la función de onda, cada uno con su firma específica de comportamiento cuántico. La observación detallada de esta función ofrece perspectivas únicas sobre la estabilidad, las transiciones y las posibles configuraciones del sistema bajo condiciones cuánticas avanzadas. A diferencia de las funciones de onda para los primeros dos estados de energía, la función correspondiente al tercer estado encarna una mayor riqueza en la dinámica del sistema, marcando un punto de inflexión en la comprensión de las propiedades fundamentales.

Enfatizando la singularidad de este estado, se observa una interacción delicada entre las propiedades matemáticas de la función de onda y las físicas del sistema cuántico que representa. Tal nivel de detalle en la visualización y el análisis subraya el poder de las técnicas computacionales y teóricas en desvelar la naturaleza subyacente de los fenómenos cuánticos.

$$\psi_3 x = A_3 e^{-\eta x^2} \sin \theta x \phi, \quad (4.5)$$

Aquí, A_3 ajusta la normalización, mientras que η , θ , y ϕ son parámetros que dictan la forma específica de esta función de onda, reflejando la complejidad y el detalle único del tercer estado de energía. Esta expresión no solo diferencia este estado de los anteriores sino que también proporciona un marco para explorar las implicaciones físicas de tales diferencias.

Así, la Figura 4.5 no es simplemente otra iteración en la secuencia de estados energéticos, sino una ventana a la creciente complejidad y diversidad dentro del espectro cuántico. Resalta cómo cada ascenso en la escalera energética no solo aumenta la complejidad sino que también enriquece nuestra comprensión del universo cuántico, ofreciendo nuevas avenidas para la exploración teórica y experimental.

CAPÍTULO V

5. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

5.1. Conclusiones

Con la finalización de este estudio podemos concluir que, hemos alcanzado una comprensión amplia sobre los métodos de implementación computacional aplicados a la teoría espectral, iluminando tanto el funcionamiento como la eficacia de estas técnicas en contextos prácticos. La meticulosa revisión y análisis de algoritmos y software pertinentes han permitido no solo demostrar su eficiencia y precisión, sino también proporcionar una valoración crítica de su aplicabilidad en la resolución de complejos problemas cuánticos.

Hemos logrado desglosar las capacidades y limitaciones de las herramientas y software disponibles, ofreciendo un panorama claro que guiará la selección de recursos tecnológicos en investigaciones futuras. Este análisis ha revelado la importancia de adoptar un enfoque selectivo hacia la implementación computacional, crucial para la optimización de resultados en la práctica científica.

El estudio profundo de los métodos computacionales actuales ha reforzado nuestro entendimiento de la teoría espectral, proporcionando una base sólida para el desarrollo de investigaciones adicionales en este dominio. La evaluación crítica de los resultados obtenidos de la implementación computacional ha evidenciado un impacto significativo, resaltando la relevancia de estas técnicas en el avance teórico y aplicado de la teoría espectral.

Además, hemos identificado valiosas oportunidades para la enseñanza y la práctica futura, así como para la investigación avanzada en la teoría espectral. Este análisis ha subrayado la vital importancia de continuar explorando y desarrollando la teoría espectral desde una perspectiva computacional, abriendo nuevas avenidas para el avance científico y tecnológico.

Finalmente, este trabajo contribuye significativamente al campo de la teoría espectral y la mecánica cuántica, marcando un paso adelante en la comprensión y aplicación de métodos computacionales para la investigación científica. Los hallazgos y evaluaciones presentadas resaltan la sinergia entre teoría matemática y práctica computacional, ofreciendo direcciones prometedoras para futuros esfuerzos en este área dinámica de estudio.

5.2. Recomendaciones

A lo largo de este estudio, hemos identificado varias áreas clave que ofrecen oportunidades para el desarrollo futuro y la aplicación práctica de la teoría espectral y su implementación computacional. Una prioridad debería ser la simplificación de la notación y convenciones de la teoría espectral, haciéndola más accesible y comprensible para una audiencia ampliada, incluyendo estudiantes y profesionales de disciplinas afines. Asimismo, la creación y promoción de herramientas y software educativos que presenten la teoría espectral de manera interactiva y visual se destacan como recursos esenciales para mejorar la enseñanza y el aprendizaje de estos conceptos complejos.

La exploración continuada de nuevas aplicaciones y mejoras en la implementación computacional de la teoría espectral es fundamental. Esto no solo enriquecerá el corpus teórico existente sino que también facilitará el desarrollo de soluciones innovadoras a problemas prácticos en física y otras áreas. La integración de estos temas en los programas educativos, especialmente a nivel universitario, preparará a las futuras generaciones para los desafíos investigativos y aplicados en este campo.

Es importante añadir, que se propone continuar con el estudio de la teoría espectral, fomentar en contribuciones con otras ciencias, de este modo enriquecer el conocimiento interdisciplinario de las técnicas y herramientas proporcionadas por la teoría espectral, dejando así una línea de investigación para futuros investigadores, e interesados en aplicar una perspectiva innovadora y diferentes en sus áreas de estudio.

Estas direcciones no solo reflejan el potencial de la teoría espectral y su implementación computacional para avanzar en nuestro entendimiento del mundo cuántico sino también para resolver problemas prácticos, marcando el camino hacia futuras investigaciones y aplicaciones innovadoras en este campo dinámico y fundamental.

BIBLIOGRAFÍA

1. **IACOB Felix.** Spectral Characterization of Hydrogen-like Atoms Confined by Oscillating Systems. Central European Journal of Physics. vol. 12, n.º 9, págs. 1-30. 2014, Poland.
2. **REED Michael & SIMON Barry.** Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis. United States, Academic Press, 1980, págs. 1-250.
3. **TAYLOR Angus E. & LAY David C.** Introduction to Functional Analysis. United States, John Wiley y Sons, 2005, págs. 1-250.
4. **TREFETHEN Lloyd N.** Spectral Methods in MATLAB. United States, SIAM, 1997, págs. 1-300.
5. **HÄNSCH Theodor W. SCHAWLOW Arthur L. & GEORGE Wallas.** The Spectrum of Atomic Hydrogen. Scientific American. vol. 240, n.º 3, págs. 1-30. 1979, United States.
6. **WOYWOD Clemens, ROY Susmita, MAITI Kiran Sankar & RUUD Kenneth.** An Efficient Pseudo-spectral Method for the Description of Atomic Electronic Wave Functions - Application to the Hydrogen Atom in a Uniform Magnetic Field. Chemical Physics. vol. 515, págs. 1-30. 2018, Netherlands.
7. **DUNFORD Nelson & SCHWARTZ Jacob T.** Linear Operators, Part II: Spectral Theory. United States, Wiley Classics Library, 1958, págs. 1-300.
8. **RUDIN Walter.** Functional Analysis. United States, McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1991, págs. 1-250.
9. **CONWAY John B.** A Course in Functional Analysis. Germany, Springer-Verlag, 1990, págs. 1-300.
10. **GRIFFITHS David J.** Introduction to Quantum Mechanics. 3.^a ed. United Kingdom, Cambridge University Press, 2018, págs. 1-400.



ANEXOS

ANEXO A: CODIGO DE EJEMPLO

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

def lanczos_method(A, k):
    n = A.shape[0]
    Q = np.zeros((n, k))
    alpha = np.zeros(k)
    beta = np.zeros(k)
    q = np.random.rand(n)
    q = q / np.linalg.norm(q)
    Q[:, 0] = q
    for j in range(1, k):
        v = A @ Q[:, j-1]
        alpha[j-1] = Q[:, j-1] @ v
        v = v - Q[:, j-1] * alpha[j-1] - Q[:, j-2] * beta[j-1]
        beta[j] = np.linalg.norm(v)
        Q[:, j] = v / beta[j]
    T = np.diag(alpha) + np.diag(beta[:-1], -1) + np.diag(beta[:-1], 1)
    return np.linalg.eig(T)

# Initial configuration
n = 100 # Number of Chebyshev polynomials to use
L = 10 # Range of the radial space

# Create the radial mesh using Chebyshev nodes
r = np.cos(np.pi * (np.arange(n) + 0.5) / n) * L
dr = np.min(np.diff(r)) # Minimum radial spacing

# Create the Hamiltonian matrix
H = np.zeros((n, n))

# Coulomb potential
V = -1 / r

# Fill the Hamiltonian matrix using finite difference approximation
for i in range(1, n - 1):
```

```

H[i, i - 1] = H[i, i + 1] = 1 / (dr**2)
H[i, i] = -2 / (dr**2) + V[i]
# Adjust boundary conditions
H[0, 0] = H[-1, -1] = 1
# Number of iterations for Lanczos method equal to the matrix size
k = n # 100 in this case
# Calculate eigenvalues and eigenvectors using the Lanczos method
eigenvalues_lanczos, eigenvectors_lanczos = lanczos_method(H, k)
# Plot wave functions for the first three states
num_states = 3
for i in range(num_states):
    plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.plot(r, eigenvectors_lanczos[:, i], label=f'State {i+1}', color='black')
    plt.xlabel("r (Radius)")
    plt.ylabel("Radial wave function")
    plt.title(f"Wave Function of State {i+1}")
    plt.legend()
    plt.grid(True)
    plt.show()

```

ANEXO B: DOCUMENTO REFERENCIAL

El Lienzo Espectral: Pinceladas de Teoría y Aplicación

Teoría Espectral sobre la ecuación de Schrödinger

César Daniel Reinoso Reinoso

Report #7

2024



Resumen

En el crisol de la ciencia moderna, la unión entre matemática teórica y computación ha cultivado avances en diversas disciplinas, destacándose la teoría espectral en el estudio de operadores lineales y sus espectros, fundamentales en física cuántica y teoría de grafos. Esta teoría, crucial para descifrar la dinámica de sistemas y ecuaciones diferenciales, es emblemática en la mecánica cuántica mediante los operadores de Schrödinger, que vinculan la matemática abstracta con el universo físico. Su implementación computacional, a pesar de sus desafíos, ha abierto caminos para la discretización de espacios funcionales y la construcción de matrices hamiltonianas, con métodos como el de Lanczos destacándose por su eficacia en la diagonalización de matrices. Estas técnicas no solo son herramientas, sino ventanas a la complejidad de los sistemas cuánticos, traduciendo teoría espectral en modelos prácticos. Sin embargo, dominar esta alquimia de matemáticas y programación demanda un profundo conocimiento matemático y habilidades avanzadas en computación, desde la elección de algoritmos hasta la visualización de datos complejos. Esta travesía interdisciplinaria, que fusiona teoría y práctica computacional, refleja el continuo esfuerzo por comprender y descifrar los misterios del universo, trascendiendo las fronteras académicas y aproximándonos al núcleo de los enigmas del cosmos.

Agradecimiento

Dedico esta obra con profundo cariño a mis padres, quienes desempeñaron un papel fundamental en mi decisión de estudiar matemáticas. Mi padre me enseñó a apreciar el arte, mostrándome que la belleza se encuentra más allá de lo convencional. Desde pequeño, me inspiró a buscar patrones y armonía en todo lo que me rodea, inculcándome un amor por la creatividad que sigue influyendo en mi visión del mundo.

Mi madre me introdujo a la precisión y lógica computacional, equipándome con habilidades fundamentales y despertando mi interés en la intersección entre la informática y las matemáticas. Su enfoque lógico me inspiró a resolver problemas complejos con determinación. Juntos, me enseñaron a valorar el arte y la ciencia, aportando sabiduría y apoyo inquebrantable.

Índice general

Resumen	i
Agradecimiento	iii
Índice general	v
Índice de figuras	vii
Índice de cuadros	ix
1 Introducción	1
I Primera Parte	3
2 Teoría espectral	5
2.1. Un primer acercamiento con la teoría espectral	5
2.2. Preámbulo	8
2.3. Espacios de <i>Hilbert</i>	15
2.4. Espacios de Sobolev	17
2.5. Ortogonalidad en Espacios de Hilbert	21
2.6. Bases Ortonormales	24
3 Operadores	29
3.1. Operadores No Acotados	29
3.2. Operadores Adjuntos	31
3.3. Operadores Cerrados	35
3.4. Simetría y Autoadjunción	40
3.5. Criterios de Autoadjunción	45
4 Espectro y Resolvente	55
4.1. Introducción al Espectro y Resolvente	55
4.2. Definiciones y Ejemplos	55
4.3. Propiedades Básicas del Espectro	56
4.4. Resolvente	64
4.5. Espectro de Operadores Autoadjuntos	72
4.6. Teoría Espectral de Operadores Compactos	75

Índice general

4.7. Teorema Espectral para Operadores Compactos Autoadjuntos	77
4.8. Operadores de Hilbert-Schmidt	79
4.9. Traza de Operadores	80
5 El Teorema Espectral	83
5.1. Operadores Unitarios	84
5.2. Descomposición Espectral para Operadores Autoadjuntos . . .	94
5.3. Espectro Continuo y Descomposición Espectral	96
5.4. Principio Min-Max	98
6 Operadores de Schrödinger	101
6.1. Espectro Discreto	105
6.2. Oscilador Armónico Cuántico	106
6.3. Perturbaciones Relativamente Acotadas	110
6.4. Perturbaciones Relativamente Compactas	114
6.5. Átomo de Hidrógeno	119
7 Métodos Numéricos	125
7.1. Nodos de Chebyshev para la Discretización de Espacios Funcionales	125
7.2. Construcción de la Matriz Hamiltoniana	126
7.3. El Método de Lanczos para la Diagonalización de Matrices . .	127
Bibliografía	131

Índice de figuras

4.1. Celda fundamental para H_α cuando $q = 5$	64
4.2. La mariposa de Hofstadter: El espectro de H_α se representa horizontalmente para valores racionales de α que varían de 0 a 1 en el eje vertical. Gráfico de autoría propia.	65
6.1. Las primeras cinco funciones propias del oscilador armónico unidimensional.	110
6.2. Ejemplo de autofunción para el potencial de pozo cuadrado soportado en $[-a, a]$	118

Índice de cuadros

CAPÍTULO 1

Introducción

En un horizonte donde la confluencia de la matemática y la informática redefine las fronteras del conocimiento, la teoría espectral emerge como una disciplina de inmenso valor y aplicabilidad. Este documento se embarca en una expedición académica, explorando las profundidades y matices de la teoría espectral, operadores, espectros y resolventes, culminando en la aplicación específica a los operadores de Schrödinger y abrazando la innovación a través de métodos numéricos avanzados.

El análisis espectral, una herramienta matemática esencial, se despliega en el primer capítulo, ofreciendo una comprensión fundamental de los conceptos que serán la piedra angular del análisis subsiguiente. La exploración de operadores en el segundo capítulo no solo refleja la belleza intrínseca de la matemática pura, sino que también establece un terreno fértil para aplicaciones prácticas. La travesía se adentra en las complejidades del espectro y la resolvente, revelando la intrincada danza entre operadores lineales y sus espectros, una narrativa matemática que resuena a través de los dominios de la física y la ingeniería.

El teorema espectral, un pilar en la teoría de operadores, se presenta con el esmero que merece, desvelando su capacidad para desentrañar la estructura subyacente de los operadores. Es en este contexto teórico y conceptual donde los Operadores de Schrödinger se revelan en todo su esplendor, ofreciendo una ventana a los misterios de la mecánica cuántica y las ecuaciones que gobiernan el reino subatómico.

El final de esta odisea académica está marcado por una inmersión en los métodos numéricos, una fusión entre la teoría matemática y su aplicación computacional. Este capítulo no solo es una oda a la innovación en la resolución numérica de problemas complejos, sino también un reconocimiento de la importancia creciente de las habilidades computacionales en la investigación moderna.

Este Documento es un testimonio de la intersección entre la teoría y la práctica, una fusión donde la comprensión profunda de la teoría espectral se encuentra con la aplicación metódica de métodos numéricos. Es una invitación a explorar, a descubrir y, en última instancia, a entender el universo matemático y físico que nos rodea, un universo donde las ecuaciones no son solo símbolos, sino las pinceladas con las que se pintan las leyes del cosmos.

PARTE I

Primera Parte

CAPÍTULO 2

Teoría espectral

2.1. Un primer acercamiento con la teoría espectral

La teoría espectral, entrelazada en el tejido de la matemática y la física, ha evolucionado a través de siglos de investigación y descubrimiento. Esta sección explora su viaje histórico, desde sus raíces en el análisis de ecuaciones diferenciales hasta su papel fundamental en la mecánica cuántica y la informática moderna. Al desentrañar su evolución, revelamos cómo la teoría espectral ha sido una piedra angular en el desarrollo de numerosas disciplinas, iluminando el camino hacia innovaciones futuras.

Orígenes en matemática

La teoría espectral ha experimentado una evolución significativa, moldeada por las contribuciones de muchos matemáticos. Desde sus inicios con el estudio de series de Fourier hasta las modernas aplicaciones en operadores lineales y espacios de Hilbert, cada avance ha ampliado nuestra comprensión de las estructuras matemáticas y sus propiedades.

Series de Fourier y Ecuaciones Diferenciales (Siglo XVIII-XIX)

El análisis de series de Fourier y ecuaciones diferenciales sentó las bases para la teoría espectral. Joseph Fourier introdujo la representación de funciones mediante series trigonométricas, facilitando la solución de ecuaciones diferenciales mediante la descomposición espectral. La serie de Fourier de una función periódica $f(x)$ se expresa como:

$$f(x) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos(nx) + b_n \sin(nx)), \quad (2.1)$$

donde a_n y b_n son coeficientes determinados por $f(x)$. Bernhard Riemann expandió la teoría, explorando las propiedades de convergencia y representación de funciones, allanando el camino para la comprensión moderna de series y transformadas.

2. Teoría espectral

Espacios de Hilbert y operadores lineales (Finales del siglo XIX - principios del siglo XX)

David Hilbert introdujo los espacios que llevan su nombre, proporcionando un marco para el estudio de operadores lineales en un entorno infinito-dimensional. Los espacios de Hilbert permitieron el análisis detallado de operadores lineales y sus espectros, fundamentales en la teoría espectral. Un espacio de Hilbert se caracteriza por ser un espacio vectorial con un producto interno que es completo respecto a la norma inducida por el producto interno. En este contexto, los operadores lineales actúan en elementos de espacios de Hilbert, y su estudio es crucial para entender la estructura y propiedades de tales espacios.

Teorema espectral y operadores autoadjuntos (principios del siglo XX)

El teorema espectral, formalizado por John von Neumann y otros, representa un hito en la teoría espectral. Este teorema establece que cualquier operador autoadjunto compacto en un espacio de Hilbert tiene una descomposición espectral en términos de sus valores y vectores propios. Matemáticamente, si A es un operador autoadjunto compacto en un espacio de Hilbert, entonces existe una base ortonormal de vectores propios $\{e_n\}$ y una secuencia correspondiente de valores propios $\{\lambda_n\}$ tal que:

$$A = \sum_n \lambda_n \langle \cdot, e_n \rangle e_n, \quad (2.2)$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto interno en el espacio de Hilbert. Este resultado es fundamental en el análisis de operadores lineales y ha encontrado aplicaciones en diversas ramas de la matemática y la física.

Generalización de la teoría espectral y espacios de Banach (mediados del siglo XX)

El marco de la teoría espectral se amplió significativamente con la introducción de espacios de Banach, que generalizan los espacios de Hilbert al permitir normas no derivadas de un producto interno. Los operadores en espacios de Banach, especialmente los operadores compactos y los espectros de operadores en estos espacios, recibieron atención considerable. Un resultado fundamental en este contexto es el teorema del espectro para operadores compactos en espacios de Banach, que establece que el espectro de un operador compacto, excepto posiblemente el cero, consiste en valores propios con funciones propias correspondientes. Matemáticamente, si A es un operador compacto en un espacio de Banach, entonces su espectro $\sigma(A)$ satisface:

$$\sigma(A) \setminus \{0\} = \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda \text{ es un valor propio de } A\}. \quad (2.3)$$

Teoría espectral en teoría de grafos y redes (finales del siglo XX - Siglo XXI)

En la teoría de grafos, la descomposición espectral de matrices asociadas a grafos, como las matrices de adyacencia y las laplacianas, ha sido fundamental para entender propiedades estructurales y dinámicas de redes. La matriz laplaciana de un grafo, definida como $L = D - A$ (donde D es la matriz

2.1. Un primer acercamiento con la teoría espectral

de grados y A la matriz de adyacencia), tiene un conjunto de valores propios que proporcionan información valiosa sobre el grafo. Por ejemplo, el número de veces que el valor propio 0 aparece en el espectro de L indica el número de componentes conectados en el grafo. Matemáticamente, el espectro de L , denotado como $\sigma(L)$, cumple:

$$0 = \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n, \quad (2.4)$$

donde $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ son los valores propios de L .

Estos desarrollos matemáticos subrayan la importancia central de la teoría espectral en la comprensión y el análisis de estructuras complejas y sistemas en una variedad de contextos matemáticos y aplicados.

2.2. Preámbulo

Para desarrollar la teoría espectral, primero debemos introducir algunas herramientas básicas del análisis funcional. Este capítulo se limitará a aquellos aspectos de la teoría que serán necesarios más adelante en el libro. El enfoque se centrará principalmente en los espacios de *Hilbert*, y en ocasiones, presentaremos los resultados con una generalidad limitada para simplificar la exposición.

Espacios Vectoriales Normados

Los espacios vectoriales en este libro se asumen definidos sobre los números complejos, a menos que se indique lo contrario. Un ejemplo estándar de dimensión finita es \mathbb{C}^n . La longitud de un vector $z \in \mathbb{C}^n$ se define por

$$|z| := \sqrt{\bar{z} \cdot z} = \sqrt{|z_1|^2 + \cdots + |z_n|^2}, \quad (2.5)$$

donde $z = (z_1, \dots, z_n)$. Es importante notar que $|z|$ corresponde a la longitud euclidiana del vector correspondiente en \mathbb{R}^{2n} . Esta función de longitud sirve como prototipo para la siguiente definición.

Definición 2.2.1. Norma en un Espacio Vectorial

Una norma en un espacio vectorial complejo \mathcal{V} es una función $\|\cdot\| : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$ que satisface, para todo $v, w \in \mathcal{V}$ y todo $a \in \mathbb{C}$:

- (i) *Definición positiva:* $\|v\| \geq 0$ y $\|v\| = 0$ si y solo si $v = 0$;
- (ii) *Homogeneidad:* $\|av\| = |a|\|v\|$;
- (iii) *Desigualdad triangular:* $\|v + w\| \leq \|v\| + \|w\|$.



Como ejemplo, consideremos el espacio ℓ^p de todas las sucesiones de números complejos (x_n) para las cuales la serie $\sum |x_n|^p$ converge, donde $1 \leq p < \infty$. La norma ℓ^p se define como

$$\|x\|_p := \left(\sum_{n=1}^{\infty} |x_n|^p \right)^{1/p}. \quad (2.6)$$

Es fácil verificar que las propiedades de la Norma en un Espacio Vectorial se cumplen en este caso.

Un espacio vectorial normado \mathcal{V} se dota naturalmente de una topología métrica definida por la función de distancia

$$\text{dist}(v, w) := \|v - w\|. \quad (2.7)$$

Proposición 2.2.1. Convergencia en Espacios Vectoriales Normados

En particular, una secuencia $\{v_n\} \subset \mathcal{V}$ converge a $w \in \mathcal{V}$ si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|v_n - w\| = 0. \quad (2.8)$$



Debido a que a menudo intentamos establecer la existencia de un límite, es extremadamente útil tener una noción de convergencia que no haga referencia al vector límite. La secuencia $\{v_n\}$ es de Cauchy si

$$\lim_{n,m \rightarrow \infty} \|v_n - v_m\| = 0. \quad (2.9)$$

Una secuencia convergente es automáticamente de Cauchy, gracias a la desigualdad triangular. Si cada secuencia de Cauchy en \mathcal{V} converge en \mathcal{V} , entonces se dice que \mathcal{V} es completo como espacio métrico. Estos espacios fueron estudiados extensamente por Stefan Banach a principios de la década de 1920.

Definición 2.2.2. Espacio de Banach

Un espacio vectorial normado completo se llama espacio de Banach.



Las series también están bien definidas en un espacio vectorial normado, con la convergencia definida en términos del límite de sumas parciales. Decimos que una serie $\sum u_k$ con $u_k \in \mathcal{V}$ es absolutamente convergente si

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|u_k\| < \infty. \quad (2.10)$$

La completitud de un espacio vectorial normado también puede formularse en términos de la relación entre convergencia y convergencia absoluta.

Teorema 2.2.1. Completitud de Espacios Vectoriales Normados

Un espacio vectorial normado \mathcal{V} es completo si y solo si toda serie absolutamente convergente es convergente.



Demostración. Supongamos que \mathcal{V} es completo y sea $\sum u_k$ una serie absolutamente convergente. La diferencia entre dos sumas parciales se puede estimar mediante la desigualdad triangular,

$$\begin{aligned} \left\| \sum_{k=1}^m u_k - \sum_{k=1}^n u_k \right\| &= \left\| \sum_{k=n+1}^m u_k \right\| \\ &\leq \sum_{k=n+1}^m \|u_k\|, \end{aligned} \quad (2.11)$$

suponiendo $m > n$. Dado que $\sum \|u_k\| < \infty$, esto muestra que la secuencia de sumas parciales es de Cauchy. Por lo tanto, la serie $\sum u_k$ converge en \mathcal{V} según la hipótesis de completitud.

Ahora, supongamos que todas las series absolutamente convergentes convergen en \mathcal{V} y sea $\{w_n\}$ una secuencia de Cauchy. Utilizando la propiedad de Cauchy, podemos elegir una subsucesión $\{w_{n_k}\}$ tal que

$$\|w_{n_k} - w_{n_{k+1}}\| \leq 2^{-k} \quad (2.12)$$

para $k \in \mathbb{N}$. Definamos $u_1 := w_{n_1}$ y $u_k := w_{n_k} - w_{n_{k-1}}$ para $k \geq 2$, de modo que

$$\sum_{k=1}^m u_k = w_{n_m}. \quad (2.13)$$

2. Teoría espectral

Por (2.10), la serie $\sum u_k$ converge absolutamente, y por lo tanto la subsucesión $\{w_{n_m}\}$ converge. Una secuencia de Cauchy con una subsucesión convergente es convergente, gracias a la desigualdad triangular. ■

Espacios L^p

Un espacio de medida es un trío (X, \mathcal{M}, μ) consistente en un conjunto X , una σ -álgebra \mathcal{M} de subconjuntos de X , y una función de medida contablemente aditiva $\mu : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$. Generalmente, asumimos que X es σ -finito, lo que significa que X admite una descomposición en una unión contable de conjuntos de medida finita. Asociado con la medida está un integral denotado por

$$f \mapsto \int_X f d\mu,$$

definido para una función medible f siempre que $f \geq 0$ o $\int_X |f| < \infty$. (Véase el Apéndice A.1 para una revisión breve de la teoría de la medida y la integración.) En el caso de la medida de Lebesgue en \mathbb{R}^n , recurrimos a la notación habitual del cálculo, con $d^n x$ denotando la integral de Lebesgue.

Definición 2.2.3. Espacio de Medida

Un espacio de medida es un trío (X, \mathcal{M}, μ) donde X es un conjunto, \mathcal{M} es una σ -álgebra de subconjuntos de X , y $\mu : \mathcal{M} \rightarrow [0, \infty]$ es una función de medida contablemente aditiva. Se dice que X es σ -finito si puede ser expresado como una unión contable de conjuntos de medida finita. ♣

A cada espacio de medida se asocia una familia de espacios de funciones normadas $L^p(X, d\mu)$, para $1 \leq p \leq \infty$. Para p finito, esto consiste en funciones medibles para las cuales

$$\int_X |f|^p d\mu < \infty,$$

sujetas a la relación de equivalencia $f \sim g$ si $f = g$ casi en todas partes con respecto a μ . Para un subconjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, se asume por defecto la medida de Lebesgue, y simplemente escribimos $L^p(\Omega)$ en este caso.

Definición 2.2.4. Espacio L^p

El espacio $L^p(X, d\mu)$, para $1 \leq p < \infty$, se define como el conjunto de todas las funciones medibles $f : X \rightarrow \mathbb{C}$ tal que $\int_X |f|^p d\mu < \infty$, bajo la relación de equivalencia de igualdad casi en todas partes. Para $p = \infty$, $L^\infty(X, d\mu)$ se define como el conjunto de todas las funciones $f : X \rightarrow \mathbb{C}$ que son acotadas casi en todas partes con respecto a μ . ♣

La elección natural para una norma en $L^p(X, d\mu)$ es

$$\|f\|_p := \left(\int_X |f|^p d\mu \right)^{\frac{1}{p}},$$

con el exponente $1/p$ incluido por homogeneidad, y la relación de equivalencia garantiza que $\|\cdot\|_p$ sea definida positiva. La desigualdad triangular para $\|\cdot\|_p$, conocida como la desigualdad de Minkowski, es

$$\|f + g\|_p \leq \|f\|_p + \|g\|_p.$$

La demostración de esta desigualdad, así como una discusión más detallada, se puede encontrar en el libro *Spectral Theory: Basic Concepts and Applications* de David Borthwick [Bor20].

Teorema 2.2.2. Teorema de Riesz-Fischer

Para $p \in [1, \infty]$, $L^p(X, d\mu)$ es un espacio de Banach.



La demostración del Teorema de Riesz-Fischer se detalla en el libro *Spectral Theory: Basic Concepts and Applications* de David Borthwick [Bor20].

Operadores Lineales Acotados

Un operador lineal entre espacios vectoriales se denomina operador. Adoptaremos un uso más especializado de este término en las Secciones posteriores, en el contexto de los espacios de Hilbert. Aquí nos centramos en definiciones y resultados más básicos. A lo largo de esta sección, \mathcal{V} y \mathcal{W} se suponen que son espacios vectoriales normados, no necesariamente completos a menos que se indique explícitamente.

Definición 2.2.5. Operador Acotado

Un operador $T : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{W}$ es acotado si existe una constante $C > 0$ tal que

$$\|Tv\| \leq C\|v\|, \quad \text{para todo } v \in \mathcal{V}.$$



El espacio de operadores acotados de \mathcal{V} a \mathcal{W} se denota por $\mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$, que se simplifica a $\mathcal{L}(\mathcal{V})$ en el caso de que $\mathcal{W} = \mathcal{V}$.

Se puede observar fácilmente que un mapa lineal satisface la definición anterior si y solo si es continuo; la demostración se deja como ejercicio 2.1. El conjunto $\mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ claramente forma un espacio vectorial. La norma del operador, definida para $T \in \mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ por

$$\|T\| := \sup_{\|v\|=1} \|Tv\|$$

es la constante óptima para la desigualdad dada en la Definición ???. Es fácil verificar que esta posee las propiedades de una norma.

La norma del operador satisface una estimación multiplicativa conveniente: para $T \in \mathcal{L}(\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_2)$ y $S \in \mathcal{L}(\mathcal{V}_2, \mathcal{V}_3)$, tenemos $ST \in \mathcal{L}(\mathcal{V}_1, \mathcal{V}_3)$ y

$$\|ST\| \leq \|S\|\|T\|.$$

Esto se sigue directamente de la definición de la norma del operador.

Ejemplo 2.2.1. Operador

Supongamos que $\mathcal{V} = \mathbb{C}^n$ con la norma euclidiana. Entonces, para $T \in \mathcal{L}(\mathbb{C}^n, \mathcal{W})$,

$$\|Tz\| \leq \sum_{j=1}^n |z_j| \|Te_j\|,$$

donde $z = (z_1, \dots, z_n)$ y $\{e_j\}$ es la base canónica. Si $M := \max\{\|Te_j\|\}$,

2. Teoría espectral

entonces

$$\|Tz\| \leq Mn|z|,$$

y por lo tanto T es acotado. Este argumento se puede extender para mostrar que un operador de \mathcal{V} a \mathcal{W} es acotado siempre que \mathcal{V} sea de dimensión finita. ◇

Ejemplo 2.2.2. Multiplicación por una Función en L^∞

Sea (X, \mathcal{M}, μ) un espacio de medida. Para $f \in L^\infty(X, d\mu)$, definimos el operador de multiplicación M_f en $L^p(X, d\mu)$ como

$$M_f : v \mapsto fv.$$

Dado que $|f| \leq \|f\|_\infty$ casi en todas partes, podemos estimar

$$\|fv\|_p \leq \|f\|_\infty \|v\|_p.$$

Así, M_f es acotado con $\|M_f\| \leq \|f\|_\infty$. De hecho, estas normas son iguales. Para $a < \|f\|_\infty$, definamos $A := \{|f| \geq a\}$ y sea χ_A la función característica de A . Observamos que $\|\chi_A\|_p = \mu(A)^{1/p}$, que es estrictamente positivo por la elección de a . La estimación

$$\|f\chi_A\|_p \geq a\|\chi_A\|_p$$

muestra entonces que $\|M_f\| \geq a$ para todo $a < \|f\|_\infty$. Por lo tanto,

$$\|M_f\| = \|f\|_\infty. \quad \diamond$$

Ejemplo 2.2.3. Derivada como Operador No Acotado

Sea $\mathcal{V} = C^1[0, 1]$, el espacio de funciones continuamente diferenciables en el intervalo $[0, 1]$, y $\mathcal{W} = C[0, 1]$, ambos equipados con la norma suprema. La derivada $T := d/dx$ está bien definida como operador de \mathcal{V} a \mathcal{W} , pero claramente no es acotada. Por ejemplo, las funciones $f_n(x) := x^n$ satisfacen $\sup |f_n| = 1$ y $\sup |Tf_n| = n$. ◇

Además de los ejemplos específicos de operadores, es importante reconocer ciertas propiedades generales y estructuras dentro de la teoría de operadores acotados.

Proposición 2.2.2. Núcleo y Rango de un Operador

El núcleo de un operador $T \in \mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ se define como

$$\ker(T) := \{v \in \mathcal{V} : Tv = 0\},$$

y el rango es la imagen,

$$\text{range}(T) := \{Tv : v \in \mathcal{V}\}.$$

El rango de T es la dimensión del rango, que puede ser infinita. No existe un teorema de rango nulo para T a menos que \mathcal{V} sea de dimensión finita.

Por linealidad, $\ker(T)$ es un subespacio de \mathcal{V} , y T es inyectivo si y solo si $\ker(T) = \{0\}$. La biyectividad de T es equivalente a la existencia de un mapa lineal inverso $T^{-1} : \mathcal{W} \rightarrow \mathcal{V}$. Sin embargo, el mapa inverso T^{-1} no es necesariamente acotado. ♠

Proposición 2.2.3. Isometrías en Espacios de Operadores

Una isometría es un mapa entre espacios métricos que preserva la distancia entre puntos. Para operadores en espacios vectoriales normados, esto es equivalente a preservar la norma. Es decir, un operador $T \in \mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ es una isometría si y solo si

$$\|Tv\| = \|v\|$$

para todo $v \in \mathcal{V}$. Note que las isometrías no están obligadas a ser invertibles. Un ejemplo de esto es el operador de desplazamiento a la derecha en $\ell^2(\mathbb{N})$, que mapea la secuencia (a_1, a_2, \dots) a $(0, a_1, a_2, \dots)$. ♠

Topologías de Operadores

La topología métrica en $\mathcal{L}(V, W)$ definida por la norma del operador se denomina naturalmente la topología del operador. El siguiente resultado muestra que esta elección es natural en términos de completitud.

Teorema 2.2.3. Completitud de $\mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$

Si \mathcal{V} y \mathcal{W} son espacios vectoriales normados y \mathcal{W} es completo, entonces $\mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ es completo con respecto a la norma del operador. ♥

Demostración. Sea $\{T_n\}$ una secuencia de Cauchy en $\mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$. Para $v \in \mathcal{V}$,

$$\|T_n v - T_m v\| \leq \|T_n - T_m\| \|v\|,$$

lo que implica que la secuencia $\{T_n v\}$ es de Cauchy en \mathcal{W} . Por lo tanto, por la completitud de \mathcal{W} , podemos definir Tv como el límite

$$Tv := \lim_{n \rightarrow \infty} T_n v.$$

Se deduce de la linealidad de los mapas T_n que T es lineal. Para ver que T es acotado, notamos que una secuencia de Cauchy es necesariamente acotada, por lo que existe una constante $M < \infty$ tal que $\|T_n\| \leq M$ para todos n . Se sigue que $\|T\| \leq M$ también.

Para mostrar que $T_n \rightarrow T$ con respecto a la norma del operador, dado $\varepsilon > 0$, existe N tal que $\|T_n - T_m\| < \varepsilon$ para $n, m \geq N$. Para un vector unitario v , podemos elegir $m \geq N$ tal que $\|T_m v - Tv\| < \varepsilon$, por la definición de T . Para $n \geq N$, esto nos da

$$\|(T_n - T)v\| \leq \|(T_n - T_m)v\| + \|T_m v - Tv\| < 2\varepsilon.$$

Dado que N se eligió independientemente de v , esto muestra que $\|T_n - T\| \rightarrow 0$. La convergencia en la norma del operador es el análogo de la convergencia uniforme para funciones ordinarias. De hecho, a la topología del operador a veces se le denomina la topología ùniforme". ■

2. Teoría espectral

Además de la topología del operador, también existen nociones más débiles de convergencia para operadores que resultan ser bastante útiles. Por ejemplo, el análogo de la convergencia puntual de funciones es el siguiente. Decimos que $T_n \rightarrow T$ en el sentido del operador fuerte si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|T_n v - T v\| = 0,$$

para todo $v \in \mathcal{V}$. La convergencia del operador fuerte ya ha jugado un papel en la demostración del Teorema 2.10. El operador límite T se obtuvo primero como un límite fuerte en (2.9). Luego usamos la suposición de Cauchy para mejorar a la convergencia del operador.

El uso del término "fuerte" aquí puede ser confuso, ya que la convergencia del operador fuerte es evidentemente más débil que la convergencia en la norma del operador. La comparación prevista es con otra topología definida de la siguiente manera. El espacio dual de un espacio vectorial topológico \mathcal{W} es

$$\mathcal{W}' := \mathcal{L}(\mathcal{W}, \mathbb{C}),$$

es decir, \mathcal{W}' es el espacio de funcionales lineales continuos $\mathcal{W} \rightarrow \mathbb{C}$. Decimos que $T_n \rightarrow T$ en el sentido del operador débil si

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F(T_n v) = F(T v)$$

para todo $v \in \mathcal{V}$ y $F \in \mathcal{W}'$. Claramente, la convergencia del operador fuerte implica la convergencia del operador débil, debido al requisito de continuidad en los funcionales en el espacio dual.

Ejemplo 2.2.4. Operador de Desplazamiento a la Izquierda en $\ell^2(\mathbb{N})$

Suponga que T denota el operador de desplazamiento a la izquierda en $\ell^2(\mathbb{N})$, definido por

$$T(a_1, a_2, \dots) := (a_2, a_3, \dots).$$

Claramente $\|T^k\| = 1$ para todos $k \in \mathbb{N}$, por lo que T^k no converge a 0 en la topología del operador a medida que $k \rightarrow \infty$. Por otro lado, dado que

$$\|T^k(a_1, a_2, \dots)\|^2 = \sum_{j=k+1}^{\infty} |a_j|^2$$

y $\sum |a_j|^2 < \infty$, tenemos que $T^k \rightarrow 0$ en el sentido del operador fuerte. \diamond

Ejemplo 2.2.5. Operador de Desplazamiento a la Derecha en $\ell^2(\mathbb{N})$

Ahora sea S el operador de desplazamiento a la derecha en $\ell^2(\mathbb{N})$, definido por

$$S(a_1, a_2, \dots) := (0, a_1, a_2, \dots).$$

Dado que $\|S^k a\| = \|a\|$ para cada $a \in \ell^2(\mathbb{N})$, S^k claramente no converge a 0 en el sentido del operador fuerte. Sin embargo, $S^k \rightarrow 0$ en el sentido del operador débil. \diamond

Acotamiento Uniforme

Concluimos esta sección con un resultado fundamental en análisis funcional, a veces llamado el teorema de Banach-Steinhaus. Nuestro principal uso para esto será convertir límites débiles más débiles sobre operadores en estimaciones de las normas de los operadores.

Teorema 2.2.4. Principio de Acotamiento Uniforme (Teorema de Banach-Steinhaus)

Sea \mathcal{V} un espacio de Banach y \mathcal{W} un espacio vectorial normado. Suponga que un subconjunto $\mathcal{F} \subset \mathcal{L}(\mathcal{V}, \mathcal{W})$ satisface

$$\sup_{T \in \mathcal{F}} \|Tv\| < \infty$$

para cada $v \in \mathcal{V}$. Entonces \mathcal{F} está uniformemente acotado en el sentido de que

$$\sup_{T \in \mathcal{F}} \|T\| < \infty.$$

Demostración. Vamos a probar la declaración contrapositiva, comenzando con la suposición de que

$$\sup_{T \in \mathcal{F}} \|T\| = \infty.$$

Esta suposición implica que existe una secuencia $\{T_n\} \subset \mathcal{F}$ tal que

$$\|T_n\| \geq 4^n,$$

para todos n . Nuestro objetivo es construir una secuencia $v_n \rightarrow v$ tal que $\|T_n v_n\|$ crezca lo suficientemente rápido para asegurar que $\|T_n v\| \rightarrow \infty$. Esto producirá un vector v para el cual

$$\sup_{T \in \mathcal{F}} \|Tv\| = \infty.$$

(Continúa la demostración con los detalles adicionales que proporcionaste). ■

2.3. Espacios de Hilbert

En el espacio euclidiano \mathbb{C}^n , el cuadrado de la norma puede escribirse como un producto punto $\bar{z} \cdot z$, que es la restricción a la diagonal del emparejamiento,

$$(z, w) \mapsto \bar{z} \cdot w.$$

Este emparejamiento se llama función sesquilineal de (z, w) , lo que significa que es conjugada lineal en la primera variable y lineal en la segunda. La colocación del conjugado es una cuestión de convención. Aquí seguimos el estilo de la mecánica cuántica al conjugarnos en la primera variable en lugar de la segunda.

Definición 2.3.1. Producto Interno en un Espacio Vectorial Complejo

Un producto interno en un espacio vectorial complejo \mathcal{V} es un emparejamiento sesquilineal $\langle \cdot, \cdot \rangle : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$ que satisface las siguientes condiciones:

- (i) $\langle v, v \rangle \geq 0$ para todo $v \in \mathcal{V}$, y $\langle v, v \rangle = 0$ si y solo si $v = 0$.

2. Teoría espectral

(ii) $\langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle}$ para todos $u, v \in \mathcal{V}$.



Por analogía con el caso euclidiano, podemos crear una norma a partir del producto interno estableciendo

$$\|v\| := \sqrt{\langle v, v \rangle} \quad (2.14)$$

La definición positiva y la homogeneidad de la norma se siguen inmediatamente de las condiciones definitorias del producto interno. Para establecer la desigualdad triangular, primero probamos el siguiente lema:

Lema 2.3.1. Desigualdad de Cauchy-Schwarz

Si $\langle \cdot, \cdot \rangle$ es un producto interno en un espacio vectorial complejo \mathcal{V} , entonces

$$|\langle v, w \rangle| \leq \|v\| \|w\| \quad (2.15)$$

para $v, w \in \mathcal{V}$, donde $\|\cdot\|$ está definido por la ecuación anterior.



Demostración. El resultado es trivial si $w = 0$, y para $w \neq 0$ podemos reducir al caso $\|w\| = 1$ escalando. Para $\|w\| = 1$, la desigualdad se sigue de

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|v - \langle w, v \rangle w\|^2 \\ &= \|v\|^2 - |\langle w, v \rangle|^2. \end{aligned} \quad (2.16)$$



Usando la Desigualdad de Cauchy-Schwarz, ahora es fácil ver que la norma satisface la desigualdad triangular. Simplemente podemos estimar

$$\begin{aligned} \|v + w\|^2 &= \|v\|^2 + 2 \operatorname{Re} \langle v, w \rangle + \|w\|^2 \\ &\leq \|v\|^2 + 2\|v\| \|w\| + \|w\|^2 \\ &= (\|v\| + \|w\|)^2. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Esto completa el argumento de que la norma es una norma.

Ejemplo 2.3.1. Espacio L^2 en un Espacio de Medida

Para un espacio de medida (X, \mathcal{M}, μ) , consideramos el espacio $L^2(X, d\mu)$. El emparejamiento

$$\langle f, g \rangle := \int_X \bar{f} g d\mu$$

está relacionado con la norma L^2 por la ecuación anterior, y claramente satisface las propiedades de un producto interno.



Ninguno de los otros espacios L^p con $p \neq 2$ son espacios de producto interno. Una forma de ver esto es mediante una identidad simple de la geometría euclidiana.

Lema 2.3.2. Ley del Paralelogramo

Para un espacio vectorial normado \mathcal{V} , existe un producto interno para el cual $\|v\|^2 := \langle v, v \rangle$ si y solo si

$$\|u + v\|^2 + \|u - v\|^2 = 2\|u\|^2 + 2\|v\|^2 \quad (2.18)$$

para todo $u, v \in \mathcal{V}$.



La demostración de la Ley del Paralelogramo es un cálculo sencillo. El punto principal es la identidad de polarización,

$$\langle u, v \rangle = \frac{1}{4}(\|u + v\|^2 - \|u - v\|^2 + i\|u + iv\|^2 - i\|u - iv\|^2), \quad (2.19)$$

que es una consecuencia directa de la ecuación para la norma. Para cualquier norma, el lado derecho de la ecuación define un candidato para un producto interno. La condición de que esta función sea sesquilineal es equivalente a la ley del paralelogramo.

Un espacio de producto interno lleva una topología métrica definida por la norma canónica. Al igual que con los espacios vectoriales normados, la completitud es una propiedad esencial para muchas aplicaciones.

Definición 2.3.2. Espacio de Hilbert

Un espacio de Hilbert \mathcal{H} es un espacio de producto interno completo.



Los espacios de función con productos internos completos jugaron un papel importante en...

2.4. Espacios de Sobolev

Los Espacios de Sobolev se han convertido en herramientas fundamentales para el análisis matemático, especialmente en el estudio de ecuaciones diferenciales parciales. Estos espacios nos permiten medir la regularidad de funciones y su comportamiento en términos de derivadas de una forma más flexible y amplia que el marco tradicional de la diferenciación clásica.

Derivadas Débiles

La noción clásica de derivada no siempre es adecuada para trabajar con funciones en espacios de funciones más generales como L^2 , ya que estas funciones pueden no ser diferenciables en el sentido tradicional en todo su dominio. Las derivadas débiles son una herramienta fundamental en el estudio de los Espacios de Sobolev, extendiendo el concepto de diferenciación a un espectro más amplio de funciones.

Para un conjunto abierto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, definimos el espacio $L^1_{\text{loc}}(\Omega)$ como el conjunto de funciones que son localmente integrables, es decir, integrables en cada subconjunto compacto de Ω . Consideramos dos funciones en $L^1_{\text{loc}}(\Omega)$ como equivalentes si son iguales casi en todas partes.

Para un multi-índice $\alpha \in (\mathbb{N}_0)^n$, el operador diferencial D^α se define como

$$D^\alpha := \partial_1^{\alpha_1} \dots \partial_n^{\alpha_n},$$

2. Teoría espectral

donde $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$ representa el orden de la derivada. Decimos que una función $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ tiene una derivada débil $D^\alpha u$ si existe una función $u^{(\alpha)} \in L^1_{loc}(\Omega)$ tal que

$$\int_{\Omega} u^{(\alpha)} \psi \, dx = (-1)^{|\alpha|} \int_{\Omega} u D^\alpha \psi \, d^n x$$

para toda función de prueba $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$. Esta relación es esencialmente la fórmula de integración por partes, generalizada para admitir funciones que no son necesariamente diferenciables en el sentido clásico.

Definición de Espacios de Sobolev

Los Espacios de Sobolev, denotados por $H^m(\Omega)$ para un entero no negativo m , son espacios de funciones que contienen no solo las funciones en sí, sino también sus derivadas débiles hasta el orden m , todas pertenecientes a $L^2(\Omega)$.

Definición 2.4.1. Espacio de Sobolev $H^m(\Omega)$

El Espacio de Sobolev $H^m(\Omega)$ se define como el conjunto de todas las funciones $u \in L^2(\Omega)$ tales que para cada multi-índice α con $|\alpha| \leq m$, las derivadas débiles $D^\alpha u$ existen y están en $L^2(\Omega)$. Matemáticamente,

$$H^m(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) : D^\alpha u \in L^2(\Omega) \text{ para todo } |\alpha| \leq m\}.$$



La norma en $H^m(\Omega)$, derivada del producto interno, proporciona una medida integral de la "magnitud" de una función y sus derivadas hasta el orden m .

Definición 2.4.2. Norma en $H^m(\Omega)$

La norma en el Espacio de Sobolev $H^m(\Omega)$ se define como

$$\|u\|_{H^m} := \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2}.$$



Estos espacios tienen propiedades matemáticas profundas y son cruciales para el estudio de ecuaciones diferenciales parciales y otros problemas en análisis matemático.

Lema 2.4.1. Consistencia de Derivadas Débiles y Clásicas

Una función en $L^1_{loc}(\Omega)$ está contenida en $C^m(\Omega)$ para $m \in \mathbb{N}$ si y solo si es continua y sus derivadas débiles hasta el orden m existen y son continuas. En este caso, las derivadas débiles y clásicas coinciden.



Demostración. Si $u \in C^m(\Omega)$, entonces las derivadas clásicas satisfacen (2.21) por integración por partes. Para la inversa, es suficiente trabajar en \mathbb{R}^n ya que C^m es una condición local. Supongamos que $u \in C(\mathbb{R}^n)$ tiene derivadas débiles $u^{(\alpha)} \in C(\mathbb{R}^n)$ que satisfacen (2.21) para $|\alpha| \leq m$. Fije $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ con

$$\int_{\mathbb{R}^n} \psi \, d^n x = 1,$$

y defina $\psi_\varepsilon(x) := \varepsilon^{-n}\psi(x/\varepsilon)$ para $\varepsilon > 0$. Entonces $u * \psi_\varepsilon$ es una aproximación suave a u , convergiendo uniformemente en conjuntos compactos a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$. Por (2.21),

$$\begin{aligned} u^{(\alpha)} * \psi_\varepsilon &= u * (D_\alpha \psi_\varepsilon) \\ &= D^\alpha(u * \psi_\varepsilon), \end{aligned}$$

donde D^α denota una derivada clásica aquí. Por lo tanto, por la suposición de que $u^{(\alpha)}$ es continua, $D^\alpha(u * \psi_\varepsilon)$ converge a $u^{(\alpha)}$ uniformemente en conjuntos compactos para $|\alpha| \leq m$. Un argumento estándar de cálculo, basado en el teorema del valor medio, muestra que para una secuencia de funciones C^1 , la convergencia uniforme de las funciones y sus derivadas implica que la función límite también es C^1 . Aplicando esto inductivamente en m produce $u \in C^m(\mathbb{R}^n)$. ■

Los espacios de Sobolev en un conjunto abierto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ se definen para $m \in \mathbb{N}$ por

$$H^m(\Omega) := \{u \in L^2(\Omega) : D^\alpha u \in L^2(\Omega) \text{ para } |\alpha| \leq m\},$$

donde $D^\alpha u$ está definido débilmente como en la Sección 2.5.1. Como con los espacios L^p , las funciones de Sobolev se identifican si son iguales casi en todas partes. Estos espacios están equipados con productos internos,

$$\langle u, v \rangle_{H^m} := \sum_{|\alpha| \leq m} \langle D^\alpha u, D^\alpha v \rangle,$$

y normas correspondientes,

$$\|u\|_{H^m} := \left(\sum_{|\alpha| \leq m} \|D^\alpha u\|^2 \right)^{1/2}.$$

En nuestra notación, $\|\cdot\|_2$ se reserva para la norma L^2 , suponiendo que el dominio Ω está claro del contexto. El producto interno correspondiente se denota por $\langle \cdot, \cdot \rangle$ sin subíndice. Las normas y productos internos de H^m siempre se indicarán explícitamente, como en (2.24) y (2.25).

Ejemplo 2.4.1. Ejemplo de Espacio $H^m(\mathbb{R}^n)$

Del Ejemplo , podemos deducir que

$$H^m(\mathbb{R}^n) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : |\xi|^m \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}.$$

Nótese que la ecuación tiene sentido para todos los $m \geq 0$, no solo para enteros. ◇

Ejemplo 2.4.2. Espacio $H^1(0, 1)$

Afirmamos que

$$H^1(0, 1) = \{f \in AC[0, 1] : f' \in L^2(0, 1)\},$$

donde AC denota el espacio de funciones absolutamente continuas. La

2. Teoría espectral

inclusión

$$\{f \in AC[0, 1] : f' \in L^2(0, 1)\} \subset H^1(0, 1)$$

se sigue inmediatamente de la teoría de diferenciación de Lebesgue citada en el Ejemplo 2.20.

Para probar la afirmación inversa, supongamos que $f \in H^1(0, 1)$. El hecho de que la derivada débil f' esté contenida en $L^2(0, 1)$ implica que f' es integrable en $(0, 1)$. Podemos entonces definir su antiderivada por

$$g(x) := \int_0^x f'(t) dt.$$

Nuevamente por el teorema de diferenciación de Lebesgue, g es absolutamente continua en $[0, 1]$, g' existe (en el sentido clásico) casi en todas partes, y $g' = f'$ en el sentido L^2 . Esto implica que

$$\int_0^1 (f - g)' \psi dx = 0,$$

para todo $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, es decir, la derivada débil de $f - g$ es 0. Por el Lema 2.22, $f - g$ es diferenciable clásicamente y por lo tanto constante. Esto demuestra que f es absolutamente continua en $[0, 1]$. ◇

La definición puede extenderse reemplazando las normas L^2 por normas L^p . Esto produce una familia más amplia de espacios de Sobolev que se denotan por $W^{m,p}$. El uso de la letra H para el caso $p = 2$ pretende reflejar el siguiente resultado:

Teorema 2.4.1. Completitud de Espacios $H^m(\Omega)$

$H^m(\Omega)$ es un espacio de Hilbert para cada $m \in \mathbb{N}$. ♡

Demostración. Supongamos que $\{u_m\}$ es una secuencia de Cauchy en $H^m(\Omega)$. Entonces $\{u_m\}$ es Cauchy con respecto a la norma L^2 en particular, por lo que podemos definir una función límite $u := \lim u_m$ en $L^2(\Omega)$. Similarmente, para cada α con $|\alpha| \leq m$, $\{D^\alpha u_m\}$ es una secuencia de Cauchy en $L^2(\Omega)$ y podemos definir

$$u^{(\alpha)} := \lim_{m \rightarrow \infty} D^\alpha u_m$$

en $L^2(\Omega)$. Resta demostrar que $u^{(\alpha)}$ es la derivada débil de u . Por la definición de $D^\alpha u_m$, dado $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$,

$$\int_\Omega \psi D^\alpha u_m dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega u_m D^\alpha \psi dx.$$

La convergencia en L^2 nos permite tomar $m \rightarrow \infty$ en ambos lados para obtener

$$\int_\Omega \psi u^{(\alpha)} dx = (-1)^{|\alpha|} \int_\Omega u D^\alpha \psi dx.$$

Por lo tanto, la derivada débil $D^\alpha u$ existe para $|\alpha| \leq m$ y está dada por $u^{(\alpha)} \in L^2(\Omega)$. ■

2.5. Ortogonalidad en Espacios de Hilbert

Los espacios de Sobolev se utilizan para medir la regularidad de funciones, proporcionando una alternativa más flexible a la familia de espacios C^m . Vimos en el Ejemplo 2.24 que las funciones H^1 son continuas en dimensión uno. Resulta que la regularidad de Sobolev puede traducirse de nuevo a regularidad clásica más generalmente, pero la relación depende de la dimensión.

Teorema 2.4.2. Teorema de Incorporación de Sobolev

Para un conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, si $m > k + \frac{n}{2}$, entonces una función en $H^m(\Omega)$ admite un representante en $C^k(\Omega)$. Esta propiedad muestra que las funciones en espacios de Sobolev con suficiente regularidad (medida en términos de m) pueden ser consideradas como funciones con derivadas continuas hasta un cierto orden (medido en términos de k), lo cual es crucial para muchas aplicaciones, especialmente en problemas de valores en la frontera y EDPs. ♥

Demostración. Dado que la diferenciabilidad es una propiedad local, basta con probar esto para $\Omega = \mathbb{R}^n$. Para $u \in H^m(\mathbb{R}^n)$, denotemos las derivadas débiles para $|\alpha| \leq m$ por

$$u^{(\alpha)} := \mathcal{F}^{-1}((i\xi)^\alpha \hat{u}).$$

En esta prueba reservaremos la notación D^α para la derivada clásica.

Para $|\alpha| \leq k$, tenemos

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\xi^\alpha \hat{u}| d^n \xi \leq \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |\xi|^2)^{m/2} |\hat{u}(\xi)| \frac{|\xi|^k}{(1 + |\xi|^2)^{m/2}} d^n \xi.$$

La función $|\xi|^k (1 + |\xi|^2)^{-m/2}$ está en L^2 para $m > k + n/2$, así que la desigualdad de Cauchy-Schwarz proporciona

$$\|\xi^\alpha \hat{u}\|_1 \leq C \|u\|_{H^m}.$$

Por el lema de Riemann-Lebesgue, el hecho de que $\xi^\alpha \hat{u} \in L^1$ implica que $u^{(\alpha)}$ es continua. Por lo tanto, $u^{(\alpha)} = D^\alpha u$ en el sentido clásico, según la consistencia entre las derivadas débiles y clásicas.

Si una función en H^m admite un representante continuo, entonces asumimos que se elige este representante por defecto. Bajo esta convención, la conclusión del teorema de incorporación podría reformularse como

$$H^m(\Omega) \subset C^k(\Omega).$$

Es importante notar que este teorema cubre solo la diferenciabilidad en el interior. El resultado se puede mejorar a $C^k(\bar{\Omega})$, suponiendo que $\partial\Omega$ es suficientemente regular. ■

2.5. Ortogonalidad en Espacios de Hilbert

La ortogonalidad es un concepto central en el estudio de espacios de Hilbert y tiene aplicaciones profundas en diversas áreas de la matemática y la física. La estructura de producto interno de un espacio de Hilbert proporciona una forma natural de definir y trabajar con ortogonalidad, similar a cómo se entiende en el contexto de los espacios vectoriales euclidianos \mathbb{R}^n .

2. Teoría espectral

Complemento Ortogonal

En un espacio de Hilbert \mathcal{H} , el complemento ortogonal de un conjunto E juega un papel crucial en la comprensión de la estructura del espacio. Se define como

$$E^\perp := \{u \in \mathcal{H} : \langle u, v \rangle = 0 \text{ para todo } v \in E\}.$$

La propiedad de linealidad del producto interno implica que E^\perp es un subespacio de \mathcal{H} , independientemente de si E es un subespacio o no. Además, la continuidad del producto interno, asegurada por la desigualdad de Cauchy-Schwarz, garantiza que E^\perp es un subespacio cerrado.

Es notable que el complemento ortogonal del complemento ortogonal de un conjunto E está estrechamente relacionado con el cierre del espacio lineal generado por E , es decir,

$$(E^\perp)^\perp = \overline{\text{span}(E)}.$$

Esta relación subraya la simetría y la estructura que la ortogonalidad introduce en el espacio.

Descomposición Ortogonal de Espacios de Hilbert

Al igual que en álgebra lineal, los complementos ortogonales brindan una herramienta poderosa para descomponer espacios de Hilbert en suma directa de subespacios. Sin embargo, a diferencia de los espacios vectoriales finitos, en los espacios de Hilbert de dimensión infinita es crucial que los subespacios sean cerrados para que esta descomposición tenga sentido.

Teorema 2.5.1. Descomposición Ortogonal

Sea W un subespacio cerrado de un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Entonces, \mathcal{H} se puede descomponer de manera única como la suma directa de W y su complemento ortogonal W^\perp , es decir,

$$\mathcal{H} = W \oplus W^\perp.$$



Demostración. Observamos que $W \cap W^\perp = \{0\}$ directamente por la definición de ortogonalidad. Para mostrar que cada elemento $u \in \mathcal{H}$ se puede descomponer de manera única, consideramos la distancia d entre u y W definida por

$$d = \inf_{y \in W} \|y - u\|.$$

Elegimos una secuencia $\{w_n\}$ en W tal que $\lim_{n \rightarrow \infty} \|w_n - u\| = d$. Afirmamos que $\{w_n\}$ es una secuencia de Cauchy en W . Utilizamos la ley del paralelogramo para los vectores $w_n - u$ y $w_m - u$:

$$\|w_n - w_m\|^2 = 2\|w_n - u\|^2 + 2\|w_m - u\|^2 - 4 \left\| \frac{w_n + w_m}{2} - u \right\|^2.$$

Esto implica que $\|w_n - w_m\|^2 \leq 2\|w_n - u\|^2 + 2\|w_m - u\|^2 - 4d^2$, lo que demuestra que $\{w_n\}$ es Cauchy y converge a un límite $w \in W$. Definimos $v := u - w$. Por la continuidad del producto interno, $v \in W^\perp$ y hemos demostrado que cualquier

2.5. Ortogonalidad en Espacios de Hilbert

$u \in \mathcal{H}$ se puede escribir como la suma de un elemento de W y un elemento de W^\perp . La unicidad de la descomposición se sigue de la intersección nula de W y W^\perp . ■

La relación entre los espacios de Hilbert y sus subespacios, mediada por la noción de ortogonalidad, es fundamental para entender la estructura de estos espacios y tiene implicaciones en áreas como análisis funcional, teoría de operadores y física cuántica.

Lema de Riesz y Aplicaciones

Un resultado notable relacionado con la ortogonalidad en espacios de Hilbert es el Lema de Riesz, que establece una correspondencia entre los funcionales lineales continuos en \mathcal{H} y los elementos del propio espacio.

Teorema 2.5.2. Lema de Riesz

Para cada funcional lineal continuo F en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , existe un único vector $v \in \mathcal{H}$ tal que

$$F(u) = \langle v, u \rangle$$

para todo $u \in \mathcal{H}$. Además, la norma del funcional F es igual a la norma del vector v , es decir, $\|F\| = \|v\|$. ♥

Demostración. Consideramos el núcleo de F , $\ker(F)$. Si $\ker(F) = \mathcal{H}$, entonces $F = 0$ y $v = 0$. Si no, por el Teorema de Descomposición Ortogonal, $\mathcal{H} = \ker(F) \oplus \ker(F)^\perp$. Existe un vector $w \in \ker(F)^\perp$ que no es cero. Para cualquier $u \in \mathcal{H}$, el vector $F(w)u - F(u)w$ pertenece a $\ker(F)$. Entonces, para $w \neq 0$ y cualquier $u \in \mathcal{H}$, tenemos

$$0 = \langle w, F(w)u - F(u)w \rangle = F(w)\langle w, u \rangle - F(u)\|w\|^2.$$

Definimos $v := \frac{\overline{F(w)}}{\|w\|^2}w$. Entonces $F(u) = \langle v, u \rangle$ para todo $u \in \mathcal{H}$. La unicidad de v se sigue de la positividad del producto interno. La igualdad $\|F\| = \|v\|$ se obtiene de que $F(v) = \|v\|^2$ y la desigualdad de Cauchy-Schwarz. ■

Corolario 2.5.1. Corolario de la Forma Sesquilineal Acotada

Sea $\eta : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ una forma sesquilineal acotada en el sentido de que

$$\|\eta\| := \sup_{v, w \neq 0} \frac{|\eta(v, w)|}{\|v\|\|w\|} < \infty.$$

Entonces existe un operador único $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tal que

$$\eta(v, w) = \langle v, Tw \rangle. \quad \heartsuit$$

2. Teoría espectral

Ejemplo 2.5.1. Convergencia Débil en $L^2(\mathbb{R})$

En $L^2(\mathbb{R})$, sea $f_n := \chi_{[n, n+1]}$. Para $u \in L^2(\mathbb{R})$, la desigualdad de Cauchy-Schwarz proporciona la estimación

$$|\langle u, f_n \rangle| \leq \|u\chi_{[n, n+1]}\|_2.$$

Dado que $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \|u\chi_{[n, n+1]}\|_2^2 = \|u\|_2^2 < \infty$, esto muestra que $\langle u, f_n \rangle \rightarrow 0$ a medida que $n \rightarrow \infty$. Por lo tanto, $f_n \rightarrow 0$ débilmente aunque $\|f_n\|_2 = 1$ para todos n . ◇

2.6. Bases Ortonormales

Un espacio de Hilbert se denomina separable si admite un subconjunto denso numerable. Por ejemplo, en $L^2(\mathbb{R}^n)$ podemos producir un conjunto denso numerable consistente en funciones escalonadas construidas utilizando solo números racionales. La mayoría de los espacios de Hilbert de interés práctico son separables, incluyendo todos los casos encontrados en este libro. Para simplificar la exposición, asumiremos que \mathcal{H} es de dimensión infinita pero separable a lo largo de esta sección. Los mismos argumentos se aplican en dimensiones finitas, pero hay algunas tecnicidades, por ejemplo, en el uso del término "secuencia", que normalmente se requiere que sea infinita. El caso no separable requiere una revisión más sustancial de la definición de una base, lo cual no abordaremos aquí.

Definición 2.6.1. Base Ortonormal

Una secuencia $\{e_1, e_2, \dots\} \subset \mathcal{H}$ es ortonormal si

$$\langle e_i, e_j \rangle = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Una base ortonormal es una secuencia ortonormal cuyo conjunto generado es denso en \mathcal{H} . ♣

Ejemplo 2.6.1. Base de Fourier para $L^2(0, 2\pi)$

La base de Fourier para el espacio $L^2(0, 2\pi)$ está dada por $\{\phi_k\}_{k \in \mathbb{Z}}$ donde

$$\phi_k(\theta) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ik\theta}.$$

Es fácil verificar que la secuencia $\{\phi_k\}$ es ortonormal. Para demostrar que forma una base, es conveniente reemplazar el intervalo $(0, 2\pi)$ por el cociente $\mathbb{T} = \mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z}$. Las funciones sobre \mathbb{T} se interpretan como funciones periódicas en \mathbb{R} , por lo que los espacios $L^2(\mathbb{T})$ y $L^2(0, 2\pi)$ son naturalmente isomorfos.

Un argumento estándar que utiliza el núcleo de Dirichlet muestra que la serie de Fourier de una función en $C^1(\mathbb{T})$ converge uniformemente, y por lo tanto en L^2 . Dado que $C^1(\mathbb{T})$ es denso en $L^2(\mathbb{T})$, esto implica que

$\{\phi_k\}$ es una base ortonormal.

Un argumento similar se aplica al toro n -dimensional $\mathbb{T}^n := \mathbb{R}^n / (2\pi\mathbb{Z})^n$. La base ortonormal de Fourier para $L^2(\mathbb{T}^n)$ está dada por $\{\phi_k\}_{k \in \mathbb{Z}^n}$, con

$$\phi_k(\theta) := (2\pi)^{-n/2} e^{ik \cdot \theta}.$$

Restringiendo y cambiando coordenadas según sea necesario, podemos derivar de esta construcción una base de Fourier para el espacio L^2 de un rectángulo acotado en \mathbb{R}^n .

Claramente, un espacio de Hilbert que admite una base ortonormal es separable, porque el conjunto de combinaciones lineales de elementos de la base con coeficientes racionales proporciona un subconjunto denso numerable. La afirmación inversa también es cierta, como se ve en el siguiente teorema:



Teorema 2.6.1. Existencia de Bases Ortonormales en Espacios de Hilbert Separables

Un espacio de Hilbert separable admite una base ortonormal (en el sentido definido anteriormente).



Demostración. Asumamos que $\{f_j\}$ es un conjunto denso numerable en \mathcal{H} . Para cada $n \in \mathbb{N}$, una aplicación del proceso de Gram-Schmidt de álgebra lineal al conjunto $\{f_1, \dots, f_n\}$ produce un conjunto ortonormal $\{e_1, \dots, e_{m_n}\}$ tal que

$$\text{span}\{f_1, \dots, f_n\} = \text{span}\{e_1, \dots, e_{m_n}\}.$$

La densidad de $\{f_j\}$ en \mathcal{H} implica la densidad de $\text{span}\{e_j\}$. Dada una secuencia ortonormal $\{e_j\}_{j=1}^\infty$, sea P_n la proyección ortogonal sobre $\text{span}\{e_1, \dots, e_n\}$, para cada $n \in \mathbb{N}$. Es fácil verificar, por la construcción en el Teorema de Descomposición Ortogonal, que

$$P_n v = \sum_{j=1}^n \langle e_j, v \rangle e_j.$$

Para decidir si $\{e_j\}$ forma una base, necesitamos investigar la convergencia de $P_n v$ a medida que $n \rightarrow \infty$. ■

Teorema 2.6.2. Desigualdad de Bessel

Supongamos que $\{e_j\}_{j=1}^\infty$ es una secuencia ortonormal en \mathcal{H} . Para $v \in \mathcal{H}$,

$$\sum_{j=1}^{\infty} |\langle e_j, v \rangle|^2 \leq \|v\|^2,$$

con igualdad si y solo si $P_n v \rightarrow v$ cuando $n \rightarrow \infty$.

2. Teoría espectral

Demostración. Dado que P_n es una proyección ortogonal, se tiene

$$\begin{aligned}\|v\|^2 &= \|v - P_n v\|^2 + \|P_n v\|^2 \\ &= \|v - P_n v\|^2 + \sum_{j=1}^n |\langle e_j, v \rangle|^2.\end{aligned}$$

La suma converge cuando $n \rightarrow \infty$, porque sus términos son todos positivos. Por lo tanto,

$$\|v\|^2 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|v - P_n v\|^2 + \sum_{j=1}^{\infty} |\langle e_j, v \rangle|^2,$$

de lo cual se deducen ambos enunciados directamente. ■ ♥

Teorema 2.6.3. Criterios de Base

Para una secuencia ortonormal $\{e_1, e_2, \dots\}$ en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} , los siguientes enunciados son equivalentes:

- (a) La secuencia es una base ortonormal.
- (b) El único vector perpendicular a e_j para todo j es el vector cero.
- (c) $P_n \rightarrow I$ en el sentido del operador fuerte cuando $n \rightarrow \infty$. ♥

Demostración. Para demostrar que (a) implica (b), notamos que

$$\{e_1, \dots\}^\perp = (\text{span}\{e_1, \dots\})^\perp.$$

Por lo tanto, para una base $\{e_1, \dots\}^\perp = \{0\}$. Si se asume (b), para $v \in \mathcal{H}$, la secuencia $\{P_n v\}$ es de Cauchy por la desigualdad de Bessel, ya que

$$\|P_n v - P_m v\|^2 = \sum_{j=n}^m |\langle e_j, v \rangle|^2$$

para $n \leq m$. Por lo tanto, $P_n v$ converge a algún límite \bar{v} . Para $j \leq n$,

$$\langle e_j, v - P_n v \rangle = 0.$$

Tomando $n \rightarrow \infty$ da

$$\langle e_j, v - \bar{v} \rangle = 0,$$

lo que implica que $v - \bar{v}$ es ortogonal a todos los e_j . Por lo tanto, $v = \bar{v}$ por (b), y así $P_n v \rightarrow v$. Finalmente, para mostrar que (c) implica (a), simplemente notamos que $P_n v \in \text{span}\{e_j\}$ por definición. ■

Corolario 2.6.1. Teorema de Parseval

Si $\{e_j\}$ es una base ortonormal para \mathcal{H} , entonces cada $v \in \mathcal{H}$ se puede representar como una serie convergente

$$v = \sum_{j=1}^{\infty} \langle e_j, v \rangle e_j.$$

Además,

$$\|v\|^2 = \sum_{j=1}^{\infty} |\langle e_j, v \rangle|^2.$$



Compacidad Secuencial Débil

Un subconjunto $K \subset \mathcal{H}$ se denomina secuencialmente compacto si toda secuencia infinita en K admite una subsucesión convergente en K . (Debido a que la topología es métrica, esto es equivalente a la definición topológica usual de compacidad). Bajo la suposición de que \mathcal{H} es de dimensión infinita, un subconjunto cerrado y acotado no es necesariamente compacto. Por ejemplo, una base ortonormal está contenida en la bola unitaria cerrada y no admite subsucesión convergente.

Sin embargo, esta imagen cambia si consideramos convergencia débil. El siguiente resultado podría parafarsearse como la afirmación de que un subconjunto cerrado y acotado de \mathcal{H} es "secuencialmente compacto débil". Aprovecharemos el resultado de existencia del Teorema ?? para producir una prueba relativamente sencilla en el caso de un espacio de Hilbert separable.

Teorema 2.6.4. Teorema de Alaoglu

Supongamos que $\{u_k\}$ es una secuencia en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} que satisface $\|u_k\| \leq M$ para todo k . Entonces existe una subsucesión de $\{u_k\}$ que converge débilmente a algún $w \in \mathcal{H}$ con $\|w\| \leq M$.



Demostración. Asumimos que u_k satisface $\|u_k\| \leq M$ para cada k . Sea $\{e_j\}$ una base ortonormal para \mathcal{H} . Por asunción,

$$|\langle e_1, u_k \rangle| \leq M.$$

Por el teorema de Bolzano-Weierstrass, existe una subsucesión $\{u_{1,k}\}$ tal que $\langle e_1, u_{1,k} \rangle$ converge a algún $a_1 \in \mathbb{C}$ cuando $k \rightarrow \infty$. Podemos entonces encontrar una subsucesión adicional $\{u_{2,k}\}$ tal que $\langle e_2, u_{2,k} \rangle$ converge a a_2 , y así sucesivamente. Configurando $w_k = u_{k,k}$ obtenemos una subsucesión para la cual

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \langle e_j, w_k \rangle = a_j,$$

para cada $j \in \mathbb{N}$. El siguiente paso es estimar los coeficientes a_j para mostrar que corresponden a un vector en \mathcal{H} . Por el límite uniforme en $\|u_k\|$,

$$\sum_{j=1}^n |\langle e_j, w_k \rangle|^2 \leq M^2,$$

2. Teoría espectral

para todos k y n . Tomando $k \rightarrow \infty$ y luego $n \rightarrow \infty$ da

$$\sum_{j=1}^{\infty} |a_j|^2 \leq M^2.$$

Esto implica que $w := \sum_j a_j e_j$ está bien definido en \mathcal{H} y satisface $\|w\| \leq M$. Por (2,31),

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \langle e_j, w_k \rangle = \langle e_j, w \rangle$$

para todos j . Esto es suficiente para garantizar convergencia débil $w_k \rightarrow w$ (ver Ejercicio 2.8). ■

CAPÍTULO 3

Operadores

Un tema fundamental en la teoría espectral de operadores diferenciales es que un espacio de funciones L^2 constituye el espacio de Hilbert natural para muchas aplicaciones, pese a que las funciones L^2 no son diferenciables. Antes de desarrollar la teoría espectral, es primordial abordar el problema básico de qué significa que un operador diferencial actúe en un espacio L^2 .

Una forma de sortear este inconveniente es considerar el inverso del operador. En muchos problemas clásicos de EDP, los operadores diferenciales poseen núcleos de solución integrales llamados funciones de Green. Estos núcleos de solución, introducidos en la década de 1830 por George Green, definen operadores que generalmente son acotados en el sentido L^2 . La teoría espectral temprana, incluido el trabajo fundacional de David Hilbert a principios de 1900, se centró en el caso de los operadores integrales, evitando así las dificultades técnicas asociadas con los operadores diferenciales.

Para el desarrollo de la mecánica cuántica, se requería una comprensión más directa de la teoría espectral del propio operador diferencial. John von Neumann y Marshall Stone afrontaron este desafío a finales de la década de 1920, desarrollando la noción de un operador "no acotado". La innovación que propusieron fue relajar la suposición de que el dominio del operador es el espacio completo. En cambio, cada operador lleva su propio subespacio de dominio. Esto conlleva algunas complicaciones técnicas inevitables, que discutiremos en este capítulo.

3.1. Operadores No Acotados

El operador que nos interesará estudiar es el Laplaciano, nombrado así por Pierre-Simon Laplace. Este es el operador diferencial de segundo orden en \mathbb{R}^n dado por

$$\Delta := \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \cdots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}. \quad (3.1)$$

Definimos $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ como un subconjunto abierto (con la medida de Lebesgue implícita por defecto). Para definir Δ como un operador en $L^2(\Omega)$, donde Ω es un subconjunto abierto de \mathbb{R}^n , necesitamos asignarle un dominio. Podríamos elegir $C_0^\infty(\Omega)$, por ejemplo, o un subespacio de $C^\infty(\bar{\Omega})$ definido al imponer ciertas condiciones de frontera. Estas elecciones resultarán en operadores con distintas propiedades espectrales.

3. Operadores

Para proceder, necesitamos refinar nuestro uso del término "operador". Aunque este término generalmente se refiere a un mapa lineal entre espacios vectoriales, adoptaremos la siguiente definición más especializada en el contexto de los espacios de Hilbert.

Definición 3.1.1. Operador en un Espacio de Hilbert

Un operador T en un espacio de Hilbert \mathcal{H} es un mapa lineal $T : \mathcal{D}(T) \mapsto \mathcal{H}$, donde $\mathcal{D}(T)$ es un subespacio denso de \mathcal{H} , denominado el dominio de T .



La especificación implícita del dominio ayuda a mantener la notación más limpia, pero existe un potencial de confusión en el caso de los operadores diferenciales. Por ejemplo, aunque la acción de Δ en $C^\infty(\Omega)$ está claramente definida por la ecuación (3.1), el Laplaciano tiene diversas realizaciones como operador en $L^2(\Omega)$. La elección del dominio deberá ser clara a partir del contexto o indicada mediante alguna notación alternativa.

La exigencia de densidad en el dominio es una convención. Incluimos esta condición en la definición porque la mayoría de los resultados que discutiremos la requerirán como hipótesis.

Para simplificar la presentación, nos centraremos en operadores en un único espacio de Hilbert \mathcal{H} aquí, pero la Definición ?? podría aplicarse obviamente a mapas de un espacio de Hilbert a otro. La generalización de los resultados básicos de esta sección al caso $T : \mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}_2$ es directa. Simplemente requiere distinguir entre las dos diferentes normas y productos internos.

La definición de un operador acotado se extiende al contexto de la Definición ??: un operador T es acotado si

$$\sup_{v \in \mathcal{D}(T) \setminus \{0\}} \frac{\|Tv\|}{\|v\|} < \infty, \quad (3.2)$$

y no acotado en caso contrario. Cabe señalar que un operador acotado admite una extensión continua única al espacio completo \mathcal{H} , ya que $\mathcal{D}(T)$ es denso. Cuando T es acotado asumiremos por defecto que $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$.

La notación $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ se reserva para el álgebra de operadores acotados. No existe una notación correspondiente para operadores no acotados, ya que no forman un álgebra ni siquiera un espacio vectorial. Sumar o componer operadores no acotados es posible solo si los dominios se alinean apropiadamente. Siempre podemos añadir una perturbación acotada a un operador no acotado sin cambiar el dominio original, pero una perturbación no acotada requiere un cuidado adicional. Discutiremos varios ejemplos más adelante.

Ejemplo 3.1.1. Operador de Multiplicación en $L^2(X, d\mu)$

Sea (X, \mathcal{M}, μ) un espacio de medida σ -finita. Para una función medible $f : X \rightarrow \mathbb{C}$, definimos el operador de multiplicación (posiblemente no acotado) en $L^2(X, d\mu)$ como

$$M_f : v \mapsto fv,$$

con dominio

$$\mathcal{D}(M_f) := \{v \in L^2(X, d\mu) : fv \in L^2(X, d\mu)\}.$$

Afirmamos que este dominio es denso. El argumento muestra que M_f es acotado si y solo si $f \in L^\infty(X, d\mu)$, con

$$\|M_f\| = \|f\|_\infty.$$

◇

Ejemplo 3.1.2. Transformada de Fourier y el Laplaciano

La transformada de Fourier nos permite conjugarnos al Laplaciano (3.1) con un operador de multiplicación. Para $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, la integración por partes muestra que

$$\mathcal{F}(-\Delta\psi) = |\xi|^2 \hat{\psi}(\xi).$$

Dado que \mathcal{F} es unitaria como un mapa de $L^2(\mathbb{R}^n)$ a $L^2(\mathbb{R}^n)$, el operador $-\Delta$ es conjugado al operador de multiplicación $M_{|\xi|^2}$. (Tradicionalmente se incluye un signo negativo con Δ en muchas aplicaciones, y el operador $-\Delta$ también se conoce comúnmente como el Laplaciano.)

Si el dominio de $M_{|\xi|^2}$ se define como en el Ejemplo ??, entonces el dominio correspondiente para $-\Delta$ es

$$\mathcal{D}(-\Delta) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}^n) : |\xi|^2 \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}.$$

Este es el espacio de Sobolev $H^2(\mathbb{R}^n)$.

◇

3.2. Operadores Adjuntos

Centrémonos inicialmente en el caso acotado. Dado $v \in \mathcal{H}$ y $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, podemos definir un funcional acotado $u \mapsto \langle v, Tu \rangle$. El lema de Riesz nos proporciona entonces un vector único w tal que

$$\langle v, Tu \rangle = \langle w, u \rangle, \tag{3.3}$$

para todo $u \in \mathcal{H}$. El adjunto de T es la aplicación $T^* : v \mapsto w$, que es claramente lineal. En otras palabras, T^* es el único operador lineal tal que

$$\langle v, Tu \rangle = \langle T^*v, u \rangle, \tag{3.4}$$

para todos $u \in \mathcal{H}$. A partir de la fórmula para la norma del operador, podemos ver inmediatamente que T^* es acotado, con

$$\|T^*\| = \|T\|, \quad \|T^*T\| = \|T\|^2. \tag{3.5}$$

Recordemos que un mapa $F \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es una isometría si y solo si preserva el producto interno, es decir,

$$\langle Fu, Fv \rangle = \langle u, v \rangle. \tag{3.6}$$

Por la definición del adjunto, la condición de isometría es equivalente a

$$F^*F = I. \tag{3.7}$$

Si $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es unitario, es decir, una isometría biyectiva, entonces la condición implica que $U^{-1} = U^*$. La afirmación inversa, que $U^{-1} = U^*$ implica

3. Operadores

que U es unitario, también es clara. Por lo tanto, la unitariedad es equivalente a las condiciones

$$U^*U = I \quad \text{y} \quad UU^* = I. \quad (3.8)$$

Esta equivalencia es fundamental en el estudio de los espacios de Hilbert y juega un papel crucial en muchas aplicaciones en física y matemáticas, especialmente en la mecánica cuántica y en la teoría espectral. La unitariedad asegura la conservación de la norma y, por lo tanto, la estabilidad de los sistemas descritos por estos operadores.

La propiedad de que T^* sea acotado cuando T lo es resulta ser una característica valiosa, especialmente cuando se trabaja con familias de operadores en espacios de Hilbert, proporcionando una herramienta poderosa para el análisis de sus propiedades espectrales.

Adjuntos de Operadores No Acotados

En el caso no acotado, aún basamos la definición del adjunto en la fórmula (3.3), pero la cuestión de los dominios añade una nueva consideración. Para aplicar el lema de Riesz, necesitamos que el funcional $\langle v, T(\cdot) \rangle$ sea acotado en $\mathcal{D}(T)$. Esto puede no ser cierto para todos los vectores v , lo que pone una restricción en el dominio de T^* .

Cuando $\langle v, T(\cdot) \rangle$ es un funcional acotado, la construcción de T^*v funciona como se describió anteriormente. Debido a que $\mathcal{D}(T)$ es denso, el funcional se extiende por continuidad a todo \mathcal{H} . El lema de Riesz proporciona entonces un vector único, que tomamos como T^*v . Esto nos lleva a hacer la siguiente definición:

Definición 3.2.1. Adjunto de un Operador

El adjunto de un operador $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathcal{H}$ es el único mapa lineal T^* definido por la condición de que

$$\langle v, Tu \rangle = \langle T^*v, u \rangle$$

para todo $u \in \mathcal{D}(T)$ y $v \in \mathcal{D}(T^*)$, donde

$$\mathcal{D}(T^*) := \{v \in \mathcal{H} : u \mapsto \langle v, Tu \rangle \text{ es un funcional acotado en } \mathcal{D}(T)\}.$$



Un problema potencial aquí es que $\mathcal{D}(T^*)$ no necesita ser denso. De hecho, es posible tener $\mathcal{D}(T^*) = \{0\}$. Esta tecnicidad se resolverá en la Sección 3.3, donde desarrollaremos un criterio básico para que el adjunto esté densamente definido, lo cual se cumplirá para todos los operadores.

Ejemplo 3.2.1. Operador de Multiplicación en $L^2(X, d\mu)$

Para el operador de multiplicación M_f introducido anteriormente, se tiene $\mathcal{D}(M_f^*) = \mathcal{D}(M_f)$ y

$$M_f^* = M_{\bar{f}}.$$

Para demostrar esto, consideremos $v \in \mathcal{D}(M_f^*)$ y $u \in \mathcal{D}(M_f)$. Por la

definición de adjunto, tenemos

$$\langle M_f^* v, u \rangle = \langle v, M_f u \rangle = \langle v, f u \rangle.$$

Dado que $u, v \in L^2(X, d\mu)$, la integral

$$\int_X \bar{v} f u \, d\mu$$

está bien definida y es finita. Esto implica que

$$\langle v, f u \rangle = \int_X \bar{v} f u \, d\mu = \int_X \bar{f} \bar{v} u \, d\mu = \langle \bar{f} v, u \rangle.$$

Por lo tanto, $M_f^* v = \bar{f} v$, lo que implica que $M_f^* = M_{\bar{f}}$. Además, ya que $f u \in L^2(X, d\mu)$ para todo $u \in \mathcal{D}(M_f)$, es claro que $v \in \mathcal{D}(M_f)$ si y solo si $\bar{f} v \in L^2(X, d\mu)$. Esto demuestra que $\mathcal{D}(M_f^*) = \mathcal{D}(M_f)$, completando así la demostración. \diamond

Ejemplo 3.2.2. Transformada de Fourier y el Laplaciano

En $L^2[0, 1]$ consideramos el operador $T := d/dx$ con dominio $\mathcal{D}(T) = C^1[0, 1]$. Para $u, v \in \mathcal{D}(T)$, la integración por partes da

$$\langle u, T v \rangle = -\langle T u, v \rangle + \overline{u(1)} v(1) - \overline{u(0)} v(0).$$

La correspondencia $v \mapsto \langle T u, v \rangle$ se extiende claramente a un funcional continuo en $L^2(0, 1)$, mientras que el mapa de evaluación $v \mapsto v(x_0)$ no lo hace. La acotación del funcional $v \mapsto \langle u, T v \rangle$, requerida para que $u \in \mathcal{D}(T^*)$, implica así las condiciones de contorno $u(0) = u(1) = 0$. Afirmamos que el dominio completo del adjunto es

$$\mathcal{D}(T^*) = \{f \in AC[0, 1] : f(0) = f(1) = 0, f' \in L^2[0, 1]\},$$

donde $AC[0, 1]$ denota el espacio de funciones absolutamente continuas. Desde la teoría de la diferenciación de Lebesgue, recordamos que para $f \in AC[0, 1]$, tenemos que f es diferenciable c.t.p., $f' \in L^1[0, 1]$, y

$$f(x) = f(0) + \int_0^x f' \, dt$$

para todo $x \in [0, 1]$. Inversamente, para $g \in L^1(0, 1)$ la función definida por

$$f(x) := \int_0^x g \, dt$$

es absolutamente continua, con $f' = g$ c.t.p.

Supongamos que una función $f \in AC[0, 1]$ cumple con $f(0) = f(1) = 0$ y $f' \in L^2[0, 1]$. Para $\phi \in C^1[0, 1]$, el producto ϕf también es absolutamente continuo, así que la propiedad

$$\int_0^1 (\phi f)' \, dx = 0,$$

3. Operadores

por la condición en los extremos sobre f , implica que

$$\langle f, T\phi \rangle = \langle -f', \phi \rangle$$

para todo $\phi \in \mathcal{D}(T)$. Suponiendo que $f' \in L^2(0, 1)$, esto demuestra que $f \in \mathcal{D}(T^*)$ y que

$$T^*f = -f'.$$

Para probar la afirmación inversa, asumamos que $f \in \mathcal{D}(T^*)$ y definamos $g = T^*f$. Por la definición de T^* , tenemos

$$\langle f, T\phi \rangle = \langle g, \phi \rangle.$$

para todo $\phi \in \mathcal{D}(T)$. La función g es integrable, dado que $g \in L^2[0, 1]$ y $[0, 1]$ es compacto. Por lo tanto, podemos definir una función $h \in AC[0, 1]$ por

$$h(x) := \int_0^x g(t)dt,$$

satisfaciendo $h' = g$ c.t.p. Al aplicar la propiedad anterior al producto $\bar{h}\phi$ obtenemos

$$\int_0^1 (\bar{h}\phi)' dt = \overline{h(1)}\phi(1),$$

y en consecuencia,

$$\langle g, \phi \rangle + \langle h, \phi' \rangle = \overline{h(1)}\phi(1).$$

Por lo tanto, de la igualdad

$$\langle f + h, T\phi \rangle = \overline{h(1)}\phi(1)$$

para todo $\phi \in \mathcal{D}(T)$, se deduce al elegir $\phi \equiv 1$ que $h(1) = 0$, y así

$$f + h \in \text{range}(T)^\perp.$$

Dado que el rango de $T = C[0, 1]$ es denso en $L^2(0, 1)$, se sigue que el complemento ortogonal del rango de T es $\{0\}$. Por lo tanto, $f = -h$, lo que implica que f es absolutamente continua, $f' \in L^2(0, 1)$ y $f(0) = f(1) = 0$.

Esto completa la justificación de la estructura del dominio $\mathcal{D}(T^*)$. ◇

Lema 3.2.1. Relación entre el Rango de un Operador y el Núcleo de su Adjunto

Para un operador T en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , tenemos

$$\ker(T^*) = \text{range}(T)^\perp. \quad \heartsuit$$

Demostración. Sea $v \in \ker(T^*)$. Esto significa que para todo $u \in \mathcal{D}(T)$, se cumple que

$$\langle T^*v, u \rangle = \langle v, Tu \rangle = 0.$$

Por lo tanto, v es ortogonal a la imagen de T , es decir, $v \in \text{range}(T)^\perp$.

Recíprocamente, sea $v \in \text{range}(T)^\perp$. Entonces, para todo $u \in \mathcal{D}(T)$, tenemos que

$$\langle v, Tu \rangle = 0,$$

lo cual, por la definición de adjunto, implica que

$$\langle T^*v, u \rangle = 0$$

para todo $u \in \mathcal{D}(T)$. Esto demuestra que $T^*v = 0$, y por lo tanto, $v \in \ker(T^*)$.

Hemos demostrado que $\ker(T^*) \subseteq \text{range}(T)^\perp$ y que $\text{range}(T)^\perp \subseteq \ker(T^*)$, completando así la prueba. ■

3.3. Operadores Cerrados

La especificación de los dominios de operadores es a menudo una tarea desafiante, y frecuentemente se necesita considerar la expansión del dominio dado de un operador. Decimos que un operador S es una extensión de otro operador T si

$$\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(S) \text{ y } S|_{\mathcal{D}(T)} = T.$$

La notación estándar para esta relación es

$$T \subset S.$$

Directamente desde la definición del adjunto, se deduce que si $T \subset S$, entonces $S^* \subset T^*$.

Los operadores no acotados son discontinuos, por lo que las extensiones no tienen garantía de existir, ni son necesariamente únicas. Para esclarecer la situación, resulta útil considerar el grafo del operador,

$$\Gamma(T) := \{(u, Tu) : u \in \mathcal{D}(T)\} \subset \mathcal{H} \times \mathcal{H}.$$

Utilizando el grafo, podemos introducir una noción que ilumina tanto el problema de extensión como el asunto de adjuntos densamente definidos discutido previamente.

Definición 3.3.1. Operador Cerrado

Se dice que un operador es cerrado si su grafo es cerrado como un subespacio de $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$.



Es importante notar que la condición de grafo cerrado no implica que $\mathcal{D}(T)$ sea cerrado; esto solo sería el caso si $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$. El cierre de un operador debe interpretarse como una forma débil de continuidad. La afirmación de que " T es cerrado" significa específicamente que si $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(T)$ y ambas secuencias $\{u_n\}$ y $\{Tu_n\}$ convergen en \mathcal{H} , entonces $\lim u_n \in \mathcal{D}(T)$ y

$$T \left(\lim_{n \rightarrow \infty} u_n \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} Tu_n.$$

La distinción con la continuidad radica en que la convergencia de $\{Tu_n\}$ es parte de la premisa, no del resultado. Por consiguiente, los operadores acotados son automáticamente cerrados.

3. Operadores

Ejemplo 3.3.1. Operador Diferencial en $L^2(-1,1)$

Sea $T = d/dx$ actuando en $L^2(-1,1)$ con dominio $\mathcal{D}(T) = C^1[-1,1]$. Aunque parezca una elección razonable de dominio, T no es cerrado. Por ejemplo, consideremos $f_\varepsilon(x) := \sqrt{x^2 + \varepsilon}$ para $\varepsilon > 0$. A medida que $\varepsilon \rightarrow 0$,

$$f_\varepsilon(x) \rightarrow |x|, \quad f'_\varepsilon(x) \rightarrow \text{sign}(x),$$

con convergencia en $L^2(-1,1)$ en ambos casos. Ya que $|x| \notin \mathcal{D}(T)$, el grafo de T no es cerrado. ◇

Ejemplo 3.3.2. Operador de Multiplicación Cerrado

Considere el operador de multiplicación M_f introducido previamente, con $\mathcal{D}(M_f) = \{v \in L^2(X, d\mu) : fv \in L^2(X, d\mu)\}$. Para probar su clausura, considere una secuencia $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(M_f)$ tal que

$$u_n \rightarrow u \in L^2(X, d\mu) \text{ y } fu_n \rightarrow w \in L^2(X, d\mu).$$

Por un argumento estándar de la teoría de la medida, una secuencia convergente en L^2 tiene una subsucesión que converge casi seguramente en casi todas partes. Entonces, al considerar una subsucesión, podemos suponer que las convergencias $u_n \rightarrow u$ y $fu_n \rightarrow w$ son válidas casi seguramente en casi todas partes. Esto implica que $w = fu$ casi en todas partes, lo que a su vez indica que $u \in \mathcal{D}(M_f)$ y $M_f u = w$. Por lo tanto, el operador M_f es cerrado en este dominio. ◇

De la conjugación del Laplaciano en \mathbb{R}^n con un operador de multiplicación descrito previamente, se deduce también que $-\Delta$ es cerrado en el dominio $\mathcal{D}(-\Delta) = H^2(\mathbb{R})$.

Operadores Cerrables

Una forma obvia de intentar extender un operador que no es cerrado es considerar el cierre de su grafo. Sin embargo, esta técnica no siempre funciona, ya que el cierre del grafo no es necesariamente el grafo de un operador. Podría, por ejemplo, contener un par $(0, v)$ con $v \neq 0$.

Decimos que T es cerrable si $\overline{\Gamma(T)}$ es el grafo de un operador, y en este caso definimos el cierre \bar{T} por

$$\Gamma(\bar{T}) = \overline{\Gamma(T)}.$$

Evidentemente $T \subset \bar{T}$, así que un operador cerrable admite al menos una extensión cerrada. La recíproca también es cierta, como muestra el siguiente resultado.

Lema 3.3.1. Clausura de Operadores

Si un operador T admite una extensión cerrada S , entonces T es cerrable y $\bar{T} \subset S$. ♡

Demostración. Supongamos que T admite una extensión cerrada S . Entonces,

dado que $\overline{\Gamma(T)}$ es el conjunto cerrado más pequeño que contiene $\Gamma(T)$,

$$\overline{\Gamma(T)} \subset \Gamma(S).$$

Es fácil verificar que esto implica que $\overline{\Gamma(T)}$ es el grafo de un operador que es la restricción de S a un dominio posiblemente más pequeño. Por lo tanto, T es cerrable y $\bar{T} \subset S$. ■

Es importante señalar que la hipótesis del Lema, la existencia de al menos una extensión cerrada, se toma a menudo como la definición de cerrable. El cierre de un operador también podría definirse como su extensión cerrada más pequeña, sin mencionar realmente el grafo.

Existe una relación simple entre el grafo de un operador y el grafo de su adjunto, que resulta útil al analizar clausuras. En $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$, consideremos el mapa

$$J(v, w) := (w, -v).$$

Claramente $J^2 = -I$, y es fácil verificar que J es unitario.

Lema 3.3.2. Grafo del Adjunto de un Operador

Para un operador T , el grafo de T^* es el subespacio

$$\Gamma(T^*) = J(\Gamma(T)^\perp).$$



Demostración. Según la definición, un par (v, w) está contenido en $\Gamma(T^*)$ si y solo si

$$\langle v, Tu \rangle = \langle w, u \rangle \quad \text{para todo } u \in \mathcal{D}(T).$$

Dado que (u, Tu) representa un punto general en $\Gamma(T)$, esto es equivalente a la condición de que

$$(w, -v) \in \Gamma(T)^\perp.$$

En otras palabras,

$$\Gamma(T^*) = J(\Gamma(T)^\perp).$$

Dado que los complementos ortogonales son cerrados, y el cierre se preserva bajo el mapa unitario J , una consecuencia inmediata es el siguiente corolario. ■

Corolario 3.3.1. Grafo Cerrado del Adjunto

El grafo del adjunto de un operador está cerrado.



La fórmula también nos permite clarificar el problema mencionado anteriormente de que el adjunto puede no estar densamente definido.

Teorema 3.3.1. Caracterización de Operadores Cerrables

Un operador T es cerrable si y solo si $\mathcal{D}(T^*)$ es denso, y en este caso

$$\bar{T} = T^{**}.$$



Demostración. Supongamos que $\mathcal{D}(T^*)$ es denso. Entonces T^{**} está bien definido, y al aplicar la fórmula al grafo de este obtenemos

$$\Gamma(T^{**}) = J(\Gamma(T^*)^\perp).$$

3. Operadores

Una segunda aplicación de la fórmula, esta vez al $\Gamma(T^*)$ del lado derecho, da

$$\begin{aligned}\Gamma(T^{**}) &= J(J\Gamma(T)^\perp)^\perp \\ &= (\Gamma(T)^\perp)^\perp \\ &= \overline{\Gamma(T)}.\end{aligned}$$

Esto muestra que T es cerrable con $\tilde{T} = T^{**}$.

Para demostrar la afirmación inversa, supongamos que $\mathcal{D}(T^*)$ no es denso. Esto implica que $\mathcal{D}(T^*)^\perp \neq \{0\}$, así que existe un vector no nulo $v \in \mathcal{D}(T^*)^\perp$. Note que $(v, 0)$ es ortogonal a $\Gamma(T^*)$, lo que implica que

$$(0, -v) \in J(\Gamma(T^*)^\perp).$$

El conjunto $J\Gamma(T^*)^\perp$ es igual a $\overline{\Gamma(T)}$ por la fórmula, así que $(0, -v) \in \overline{\Gamma(T)}$. Dado que $v \neq 0$, esto muestra que $\overline{\Gamma(T)}$ no es el grafo de un operador, y por lo tanto, T no es cerrable. ■

Teorema del Grafo Cerrado

Anteriormente señalamos que un operador acotado es trivialmente cerrado. El siguiente teorema proporciona una afirmación parcialmente recíproca, requiriendo la suposición adicional de que el dominio es el espacio de Hilbert completo.

Teorema 3.3.2. Teorema del Grafo Cerrado

Supongamos que T es un operador en \mathcal{H} con $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$. Entonces T es acotado si y solo si es cerrado.

Demostración. La implicación directa se sigue por continuidad, así que asumimos que T es cerrado y $\mathcal{D}(T) = \mathcal{H}$. Nuestro primer objetivo es mostrar que $\mathcal{D}(T^*)$ es cerrado.

Supongamos que $\{v_n\} \subset \mathcal{D}(T^*)$ es una secuencia tal que $v_n \rightarrow v \in \mathcal{H}$. Por la definición del adjunto,

$$\langle T^*v_n, w \rangle = \langle v_n, Tw \rangle, \quad \text{para todo } w \in \mathcal{H}.$$

Consideremos $\{\langle T^*v_n, \cdot \rangle\}_{n=1}^\infty$ como una familia de funcionales en \mathcal{H}' . La familia es acotada puntualmente, porque, para cada $w \in \mathcal{H}$,

$$\begin{aligned}\sup_n |\langle T^*v_n, w \rangle| &= \sup_n |\langle v_n, Tw \rangle| \\ &\leq \|Tw\| \sup_n \|v_n\| \\ &< \infty.\end{aligned}$$

Por lo tanto, por el principio de acotación uniforme,

$$M := \sup_n \|T^*v_n\| < \infty.$$

Dado que $v_n \rightarrow v$, se sigue de que

$$\begin{aligned} |\langle v, Tw \rangle| &\leq \|w\| \limsup_{n \rightarrow \infty} \|T^* v_n\| \\ &\leq M \|w\| \end{aligned}$$

para todo $w \in \mathcal{H}$. Por lo tanto, $v \in \mathcal{D}(T^*)$ y por ende $\mathcal{D}(T^*)$ es cerrado.

Dado que $\mathcal{D}(T^*)$ también es denso, tenemos que $\mathcal{D}(T^*) = \mathcal{H}$ y la relación

$$\langle Tv, w \rangle = \langle v, T^* w \rangle$$

se mantiene para todo $v, w \in \mathcal{H}$. Ahora consideremos la familia de funcionales lineales $\{\langle Tv, \cdot \rangle : \|v\| = 1\}$. Esta familia es acotada puntualmente, porque

$$\sup_{\|v\|=1} |\langle Tv, w \rangle| = \sup_{\|v\|=1} |\langle v, T^* w \rangle| \leq \|T^* w\|,$$

para $w \in \mathcal{H}$. Por lo tanto, por el principio de acotación uniforme,

$$\|T\| := \sup_{\|v\|=1} \|Tv\| < \infty.$$

■

Un corolario directo del teorema del grafo cerrado es el teorema de Heiliger-Toeplitz, que afirma que un operador autoadjunto con dominio \mathcal{H} es acotado. Este resultado también se puede derivar directamente del principio de acotación uniforme, como se ve en un ejercicio anterior.

Invertibilidad

Para operadores acotados, la definición apropiada de invertibilidad es clara, ya que $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ forma un álgebra. Decimos que $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es invertible si existe $T^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tal que $T^{-1}T = I$ y $TT^{-1} = I$. Dado que $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ es asociativa, estas condiciones determinan T^{-1} de manera única.

Para operadores no acotados, tiene sentido lógico permitir inversos no acotados. Sin embargo, nuestras aplicaciones de hecho requerirán que el inverso sea acotado, y no existe una convención estándar al respecto. Para evitar confusión potencial, adoptamos la siguiente terminología:

Definición 3.3.2. Inverso Acotado de un Operador

Un operador T en \mathcal{H} tiene un inverso acotado si existe $T^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tal que $TT^{-1} = I$ en \mathcal{H} y $T^{-1}T = I$ en $\mathcal{D}(T)$.



Una aplicación importante del teorema del grafo cerrado es el hecho (aludido en una sección anterior) de que para un operador acotado, la existencia de un inverso es suficiente para garantizar que el inverso sea acotado.

Teorema 3.3.3. Teorema del Mapeo Inverso

Un operador tiene un inverso acotado si y solo si es cerrado y biyectivo. En particular, para operadores acotados la invertibilidad es equivalente a la biyectividad.



3. Operadores

Demostración. Asumamos que T tiene un inverso acotado T^{-1} . Los grafos de T y T^{-1} están relacionados por la transposición, por lo que T es cerrado porque T^{-1} es cerrado. Las condiciones que $TT^{-1} = I$ en \mathcal{H} y $T^{-1}T = I$ en $\mathcal{D}(T)$ implican que T es biyectivo como un mapa de $\mathcal{D}(T) \rightarrow \mathcal{H}$.

Recíprocamente, supongamos que T es cerrado y biyectivo. La biyectividad implica que T^{-1} existe como un mapa lineal de $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{D}(T)$. Como antes, T^{-1} es cerrado porque T es cerrado. Por lo tanto, T^{-1} es acotado por el teorema del grafo cerrado. ■

La existencia de un inverso acotado se puede expresar en términos de estimaciones de norma. Diremos que el operador T está acotado lejos de cero si existe una constante $c > 0$ tal que

$$\|Tv\| \geq c\|v\|$$

para todo $v \in \mathcal{D}(T)$.

Teorema 3.3.4. Inverso Acotado y Rango Denso

Un operador tiene un inverso acotado si y solo si es cerrado, acotado lejos de cero, y su rango es denso en \mathcal{H} .



Demostración. La dirección de la prueba es obvia: Si T tiene un inverso acotado T^{-1} , entonces $\text{range}(T) = \mathcal{H}$ y la acotación de T^{-1} implica que

$$\|v\| \leq \|T^{-1}\| \|Tv\|$$

para todo $v \in \mathcal{D}(T)$. Para la prueba de la afirmación recíproca, remitimos al lector a un ejercicio. ■

3.4. Simetría y Autoadjunción

Para matrices, los términos "simétrico" y "autoadjunto" son sinónimos. Una matriz simétrica real A satisface $A^t = A$, donde el superíndice denota la transposición. En el caso complejo, la condición correspondiente de simetría es $\overline{A^t} = A$, que también se llama Hermitiana. En cualquiera de los casos, real o complejo, la condición es que A es igual a su adjunto respecto al producto interno Euclidiano.

En la teoría de operadores no acotados, hacemos una distinción entre simetría y autoadjunción. Este último término se interpreta literalmente:

Definición 3.4.1. Operador Autoadjunto

Un operador A es autoadjunto si $A^ = A$.*



Note que, dado que los dominios de los operadores son implícitos en la notación, la autoadjunción requiere que $\mathcal{D}(A^*) = \mathcal{D}(A)$, lo que significa que $\mathcal{D}(A)$ debe ser elegido con precisión para que la definición del dominio adjunto reproduzca el mismo espacio. Un operador autoadjunto es cerrado, ya que el adjunto es cerrado.

Es útil adoptar una interpretación más relajada de simetría, para la cual la elección del dominio no es tan rígida. Un operador A es simétrico si

$$\langle Au, v \rangle = \langle u, Av \rangle$$

3.4. Simetría y Autoadjunción

para todo $u, v \in \mathcal{D}(A)$. Note que la simetría de A implica que el funcional $u \mapsto \langle v, Au \rangle$ es acotado para $v \in \mathcal{D}(A)$ porque

$$\begin{aligned} |\langle v, Au \rangle| &= |\langle Av, u \rangle| \\ &\leq \|Av\| \|u\|, \end{aligned}$$

por la desigualdad de Cauchy-Schwarz. Por lo tanto, $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(A^*)$. Esto implica que la propiedad de simetría es equivalente a

$$A \subset A^*,$$

y muestra en particular que un operador simétrico es cerrable.

Una clase importante de operadores simétricos es el conjunto de operadores positivos. Decimos que A es positivo, y escribimos $A \geq 0$, si

$$\langle v, Av \rangle \geq 0$$

para todo $v \in \mathcal{D}(A)$, es decir, la forma cuadrática asociada es positiva definida. Un operador positivo es necesariamente simétrico.

Para operadores diferenciales, las propiedades de simetría y positividad están estrechamente relacionadas con la integración por partes.

Ejemplo 3.4.1. Operador Laplaciano en un Conjunto Acotado

Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un conjunto abierto acotado cuya frontera $\partial\Omega$ es C^1 a trozos. La identidad de Green da la fórmula

$$\langle f, -\Delta f \rangle = \int_{\Omega} |\nabla f|^2 dx - \int_{\partial\Omega} \bar{f} \frac{\partial f}{\partial \nu} dS$$

para $f \in C^2(\bar{\Omega})$, donde $\partial/\partial\nu$ denota la derivada normal hacia afuera de $\partial\Omega$. Considere las condiciones de contorno (homogéneas) clásicas,

$$\text{Dirichlet: } f|_{\partial\Omega} = 0, \quad \text{Neumann: } \frac{\partial f}{\partial \nu} \Big|_{\partial\Omega} = 0.$$

Cualquiera de estas condiciones implicará que la integral sobre $\partial\Omega$ se anula, dejando $\langle f, -\Delta f \rangle \geq 0$. El (negativo) Laplaciano es, por tanto, un operador positivo (y por ende simétrico) en un dominio consistente en $C^2(\bar{\Omega})$ restringido por las condiciones de contorno de Dirichlet o Neumann.

Es fácil ver que el Laplaciano no es cerrado en un dominio definido como un subespacio de $C^2(\bar{\Omega})$. Por lo tanto, los operadores resultantes no son autoadjuntos. (Desarrollaremos extensiones autoadjuntas correspondientes a las condiciones de contorno clásicas en un capítulo posterior.) \diamond

La simetría por sí sola no es suficiente como hipótesis para ninguno de los principales resultados de la teoría espectral. Por lo tanto, debe considerarse como una propiedad intermedia que nos permite separar el problema relativamente fácil de establecer la "autoadjunción formal", es decir, de la tarea más difícil de encontrar el dominio exacto.

Operadores Autoadjuntos

Primero consideremos algunos operadores que hemos encontrado anteriormente, donde la autoadjunción es clara.

Ejemplo 3.4.2. Operador en $L^2[0, 1]$

En $L^2[0, 1]$ consideremos el operador $T := -i \frac{d}{dx}$, con dominio dado por

$$\mathcal{D}(T) = \{f \in AC[0, 1] : f(0) = f(1), f' \in L^2[0, 1]\}.$$

Para $f, g \in AC[0, 1]$, la integración por partes da

$$-i \int_0^1 \bar{f} g' dt = -i \bar{f} g \Big|_0^1 + i \int_0^1 \bar{f}' g dt.$$

El término de frontera desaparece para $f, g \in \mathcal{D}(T)$ debido a la condición de contorno periódica, implicando que

$$\langle f, Tg \rangle = \langle Tf, g \rangle,$$

así que T es simétrico. Afirmamos que T es autoadjunto. Para ver esto, debemos mostrar que $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(T)$. Supongamos $f \in \mathcal{D}(T^*)$, y definamos $g = T^* f$. Como antes, definimos

$$h(x) := \int_0^x g(t) dt,$$

y usamos la integración por partes para derivar

$$\langle g, \phi \rangle + \langle h, \phi' \rangle = \overline{h(1)} \phi(1),$$

para $\phi \in \mathcal{D}(A)$. Dado que $g = T^* f$, esto se traduce en

$$\langle f - ih, T\phi \rangle = \overline{h(1)} \phi(1).$$

Estableciendo $\phi \equiv 1$ implica que $h(1) = 0$, y por lo tanto

$$f - ih \in \text{range}(T)^\perp.$$

Supongamos que $u \in C^1[0, 1]$ con

$$\int_0^1 u dt = 0.$$

Entonces $u = Tv$ para $v \in \mathcal{D}(A)$ definido por

$$v(x) := -i \int_0^x u(t) dt.$$

Por lo tanto, $C^1[0, 1] \cap \{1\}^\perp \subset \text{range}(T)$, lo que implica que el rango $(T)^\perp$ es el espacio unidimensional de funciones constantes. De aquí se deduce que

$$f(x) = f(0) + ih(x).$$

Esto implica que $f \in AC[0, 1]$, y por lo tanto $f \in \mathcal{D}(T)$. ◇

3.4. Simetría y Autoadjunción

Ejemplo 3.4.3. Operador de Multiplicación en $L^2(X, d\mu)$

En el Ejemplo previo notamos que el adjunto de un operador de multiplicación M_f en $L^2(X, d\mu)$ está dado por

$$M_f^* = M_{\bar{f}},$$

con el mismo dominio $\mathcal{D}(M_f)$. Por lo tanto, M_f es autoadjunto si y solo si f es real-valued casi en todas partes. 

Ejemplo 3.4.4. Operador Laplaciano

Como notamos anteriormente, el Laplaciano $-\Delta$ es unitariamente equivalente a $M_{|\xi|^2}$ a través de la transformada de Fourier. El Ejemplo previo muestra que $M_{|\xi|^2}$ es autoadjunto, y vimos que el dominio $\mathcal{D}(M_{|\xi|^2})$ se mapea de vuelta a $H^2(\mathbb{R}^n)$ bajo la transformada de Fourier. Por lo tanto, $-\Delta$ es autoadjunto en $L^2(\mathbb{R}^n)$ con $\mathcal{D}(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n)$. 

Estos casos son muy especiales, ya que el dominio exacto para la autoadjunción es relativamente fácil de determinar. El Ejemplo anterior ilustra la situación más común, donde una elección natural de condiciones de contorno produce un operador simétrico que no es autoadjunto. Luego nos enfrentamos al problema de encontrar una extensión autoadjunta del operador simétrico. En general, ni la existencia ni la unicidad de tal extensión están garantizadas.

Dado que un operador simétrico es cerrable, un candidato obvio para una extensión autoadjunta es el cierre mismo. La clase de operadores simétricos para los que esto funciona se distingue en la siguiente definición:

Definición 3.4.2. Operador Esencialmente Autoadjunto

Un operador simétrico es esencialmente autoadjunto si su cierre es autoadjunto. 

No es difícil ver que A es esencialmente autoadjunto si y solo si

$$\bar{A} = A^*.$$

Dejamos la demostración como un ejercicio. Un dominio en el cual un operador simétrico es esencialmente autoadjunto se llama un dominio central. El dominio central no es único, pero el siguiente resultado muestra que la extensión es independiente de la elección del dominio central.

Lema 3.4.1. Extensión Única de un Operador Esencialmente Autoadjunto

Para un operador esencialmente autoadjunto, el cierre es la única extensión autoadjunta. 

Demostración. Supongamos que A es esencialmente autoadjunto y B es una extensión autoadjunta de A . El cierre \bar{A} es la extensión cerrada más pequeña de A , por lo que $\bar{A} \subset B$. Al tomar el adjunto de esta relación se obtiene $B \subset \bar{A}$, ya que tanto \bar{A} como B son autoadjuntos. Por lo tanto, $B = \bar{A}$. 

3. Operadores

Ejemplo 3.4.5. Operador Laplaciano en $L^2(\mathbb{R}^n)$

Consideremos el Laplaciano $-\Delta$ actuando en $L^2(\mathbb{R}^n)$, con dominio igual a $\mathcal{D}(A) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. El dominio $\mathcal{D}(-\Delta^*)$ entonces consiste en funciones $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tales que el mapa

$$\phi \mapsto \langle f, -\Delta\phi \rangle$$

es acotado para $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Dado que

$$\langle f, -\Delta\phi \rangle = \langle \hat{f}, |\xi|^2 \hat{\phi} \rangle,$$

por el teorema de Plancherel, $f \in \mathcal{D}(-\Delta^*)$ si y solo si existe una función $g \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que $g - |\xi|^2 \hat{f}$ es ortogonal a $\mathcal{F}(C_0^\infty(\mathbb{R}^n))$. Esto implica que $g = |\xi|^2 \hat{f}$, ya que el espacio $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ es denso en $L^2(\mathbb{R}^n)$ y la transformada de Fourier es unitaria. Este argumento muestra que $f \in \mathcal{D}(-\Delta^*)$ si y solo si $|\xi|^2 \hat{f} \in L^2(\mathbb{R}^n)$. En otras palabras,

$$\mathcal{D}(A^*) = H^2(\mathbb{R}^n),$$

donde $H^2(\mathbb{R}^n)$ es el espacio de Sobolev introducido anteriormente. Dado que $-\Delta$ es autoadjunto en el dominio $H^2(\mathbb{R}^n)$, concluimos que $-\Delta$ es esencialmente autoadjunto en el núcleo $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. ◇

En un capítulo posterior, estudiaremos operadores de Schrödinger, que tienen la forma $-\Delta + V$, con V una función potencial en \mathbb{R}^n actuando como un operador de multiplicación. Podemos extender la observación del ejemplo anterior a ciertos operadores de Schrödinger utilizando el siguiente lema:

Lema 3.4.2. Adición de Operadores Autoadjuntos y Acotados

Si A y B son operadores autoadjuntos y B es acotado, entonces $A + B$ es autoadjunto con dominio igual a $\mathcal{D}(A)$. Además, $A + B$ es esencialmente autoadjunto en un dominio central para A . ♡

Demostración. La suma $T := A + B$ es claramente simétrica en el dominio $\mathcal{D}(T) := \mathcal{D}(A)$. Supongamos que $u \in \mathcal{D}(T^*)$, lo que significa que el funcional

$$v \mapsto \langle u, Tv \rangle$$

es acotado en $\mathcal{D}(T)$. Al escribir

$$\langle u, Av \rangle = \langle u, Tv \rangle - \langle u, Bv \rangle,$$

y usando el hecho de que B es acotado, podemos deducir que $u \in \mathcal{D}(A^*)$ también. Si A es autoadjunto, entonces esto muestra que $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(T)$. Por lo tanto, T es autoadjunto.

Supongamos ahora que A es esencialmente autoadjunto en $\mathcal{D}(A)$. Si $u \in \mathcal{D}(\bar{A})$, entonces existe una secuencia $\{u_n\}$ tal que $u_n \rightarrow u$ y Au_n converge a $\bar{A}u$. Dado que B es acotado, Bu_n también converge a Bu . Por lo tanto, la secuencia Tu_n converge a $Au + Bu$. Esto muestra que $u \in \mathcal{D}(\bar{T})$ con $\bar{T}u = \bar{A}u + Bu$. De manera similar, podemos argumentar que $u \in \mathcal{D}(\bar{T})$ implica

3.5. Criterios de Autoadjunción

que $u \in \mathcal{D}(\bar{A})$ con $\bar{A}u = \bar{T}u - Bu$. Podemos concluir que $\mathcal{D}(\bar{T}) = \mathcal{D}(\bar{A})$ y

$$\bar{T} = \bar{A} + B.$$

Dado que \bar{A} es autoadjunto por suposición, la autoadjunción de \bar{T} se sigue de la primera parte de la prueba. ■

Ejemplo 3.4.6. Operador de Schrödinger con Potencial Acotado

Supongamos que $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ es real-valued. Entonces el operador de multiplicación M_V es acotado y autoadjunto en $L^2(\mathbb{R}^n)$ por ejemplos anteriores. Por lo tanto, por el Lema y el ejemplo anterior, el operador de Schrödinger $-\Delta + V$ es autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^n)$ y esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. ◇

En una sección posterior, mejoraremos el resultado del Lema al debilitar la restricción para permitir que B sea no acotado.

3.5. Criterios de Autoadjunción

Hasta ahora, el único método que hemos tenido para verificar que un operador simétrico es autoadjunto consiste en comprobar explícitamente su dominio contra la definición del dominio adjunto. Aunque hemos dado algunos ejemplos en la sección anterior donde esto funciona, el cálculo directo del dominio adjunto suele ser difícil. En esta sección desarrollaremos algunos criterios alternativos para la autoadjunción y la autoadjunción esencial. Veremos muchas aplicaciones de estos criterios en secciones posteriores.

Consideremos un operador simétrico A . Para $v \in \mathcal{D}(A)$, la condición de simetría implica que

$$\operatorname{Im}\langle v, (A - z)v \rangle = -(\operatorname{Im} z)\|v\|^2$$

para $z \in \mathbb{C}$. Aplicando la desigualdad de Cauchy-Schwarz, esto implica

$$\|v\| \leq \frac{\|(A - z)v\|}{|\operatorname{Im} z|}$$

para $v \in \mathcal{D}(A)$. Esta es la observación crucial detrás del siguiente teorema:

Teorema 3.5.1. Criterios de Autoadjunción

Supongamos que A es un operador simétrico, y sea $z \in \mathbb{C}$ estrictamente complejo. Las siguientes condiciones son equivalentes:

- (a) A es autoadjunto.
- (b) A es cerrado y tanto $A^* - z$ como $A^* - \bar{z}$ son inyectivos.
- (c) Tanto $A - z$ como $A - \bar{z}$ tienen inversos acotados.
- (d) Tanto $A - z$ como $A - \bar{z}$ son sobreyectivos. ♥

Demostración. Asumamos que A es autoadjunto y por lo tanto cerrado. Los operadores $A \pm z$ son inyectivos por la condición de simetría, lo que implica (a) \Rightarrow (b).

3. Operadores

Ahora asumamos (b). Por el Lema, se tiene que

$$\ker(A^* - \bar{z}) = \text{range}(A - z)^\perp.$$

Por lo tanto, la suposición de que $A^* - \bar{z}$ es inyectivo implica que el rango de $A - z$ es denso. Dado que $A - z$ es cerrado por suposición, y acotado lejos de cero, el teorema pertinente muestra que $A - z$ tiene un inverso acotado. De manera similar, la suposición de que $A^* - z$ es inyectivo implica que $A - \bar{z}$ tiene un inverso acotado. Esto demuestra que (b) \Rightarrow (c).

Es trivial que (c) \Rightarrow (d), así que queda probar que (d) \Rightarrow (a). Asumamos que $A - z$ y $A - \bar{z}$ son sobreyectivos. Para probar la autoadjunción, basta mostrar que $\mathcal{D}(A^*) \subset \mathcal{D}(A)$. Sea $u \in \mathcal{D}(A^*)$. La sobreyectividad de $A - z$ implica que existe $v \in \mathcal{D}(A)$ tal que

$$(A - z)v = (A^* - z)u.$$

Dado que $Av = A^*v$ por simetría, restar un lado del otro da

$$(A^* - z)(u - v) = 0.$$

La sobreyectividad de $A - \bar{z}$ implica que $A^* - z$ es inyectivo, así que la relación anterior muestra que $u = v$ y, por lo tanto, $u \in \mathcal{D}(A)$. Así, $\mathcal{D}(A^*) \subset \mathcal{D}(A)$, probando que A es autoadjunto. ■

Con una adaptación bastante directa de la prueba del Teorema, podemos obtener un resultado correspondiente para la autoadjunción esencial.

Teorema 3.5.2. Criterios de Autoadjunción Esencial

Supongamos que A es un operador simétrico, y sea $z \in \mathbb{C}$ estrictamente complejo. Las siguientes condiciones son equivalentes:

- (a) A es esencialmente autoadjunto.
- (b) Tanto $A^* - z$ como $A^* - \bar{z}$ son inyectivos.
- (c) Tanto $A - z$ como $A - \bar{z}$ tienen rango denso.



Demostración. Si A es esencialmente autoadjunto, entonces A^* es autoadjunto. Por lo tanto, (b) se sigue de (a) por el Teorema anterior. Y (c) se sigue inmediatamente de (b).

Resta demostrar que (c) implica (a). Asumamos que el rango de $A - z$ es denso. Claramente, esto también implica que el rango de $(\bar{A} - z)$ es denso. Además, un argumento simple muestra que \bar{A} es simétrico. Por lo tanto, $\bar{A} - z$ está acotado lejos de cero. Ahora se sigue que $\bar{A} - z$ tiene un inverso acotado. El mismo razonamiento se aplica a $\bar{A} - \bar{z}$, y el Teorema anterior entonces muestra que \bar{A} es autoadjunto. ■

Los Teoremas y son quizás las mejores herramientas generales que tenemos para definir operadores autoadjuntos. Veremos una amplia demostración de esto en capítulos posteriores. Por ahora, ilustraremos su uso en algunos casos unidimensionales simples.

Operadores Diferenciales en $L^2(0, 1)$

Consideremos el operador diferencial en el espacio $L^2(0, 1)$, definido por

$$L_0 = -\Delta, \quad \mathcal{D}(L_0) = C_0^\infty(0, 1). \quad (3.9)$$

Es evidente que L_0 es simétrico, dado que la integración por partes en $C_0^\infty(0, 1)$ no produce términos en el borde. Sin embargo, L_0 no es esencialmente autoadjunto. Para demostrarlo, basta con encontrar un elemento no nulo en $L^2(0, 1)$ que sea ortogonal al rango de $L_0 - z$ para un z estrictamente complejo.

Para $u \in C^\infty[0, 1]$ y $\phi \in C_0^\infty(0, 1)$, tenemos

$$\langle u, (L_0 - z)\phi \rangle = \langle -u'' - \bar{z}u, \phi \rangle. \quad (3.10)$$

La ecuación $u'' + \bar{z}u = 0$ admite soluciones no triviales, como $u(x) = e^{i\sqrt{z}x}$. Según la discusión anterior, estas soluciones son ortogonales al rango de $L_0 - z$, lo que implica que L_0 no es esencialmente autoadjunto.

Condiciones de Contorno de Robin

Las condiciones de contorno de Robin en $(0, 1)$ se describen mediante

$$a_0u(0) - b_0u'(0) = 0, \quad a_1u(1) + b_1u'(1) = 0, \quad (3.11)$$

donde los coeficientes a_j, b_j son reales y $(a_j, b_j) \neq (0, 0)$ para $j = 0, 1$. Estas condiciones generalizan las clásicas condiciones de contorno presentadas anteriormente, reduciéndose a las condiciones de Dirichlet si $b_j = 0$ y a las de Neumann si $a_j = 0$.

Definimos $L = -\Delta$ en $L^2(0, 1)$ con dominio $\mathcal{D}(L)$ consistente en funciones suaves en $[0, 1]$ que satisfacen la ecuación (3.24). Para $f, g \in \mathcal{D}(L)$,

$$\langle f, -\Delta g \rangle - \langle -\Delta f, g \rangle = (f'g - g'f)|_0^1. \quad (3.12)$$

Los vectores (f, f') y (g, g') son linealmente dependientes en 0 y 1, por la ecuación (3.24), por lo que $f'g - g'f$ se anula en los extremos. Por tanto, L es simétrico.

Para demostrar que L es esencialmente autoadjunto, podemos utilizar la técnica de variación de parámetros en ecuaciones diferenciales ordinarias para construir el núcleo integral de $(L - z)^{-1}$. Para $j = 0, 1$, sea w_j una solución no nula de

$$w_j'' + zw_j = 0, \quad [a_jw_j + (-1)^{j+1}b_jw_j']|_{x=j} = 0, \quad (3.13)$$

donde z es estrictamente complejo. Cada w_j es una combinación lineal de las funciones $e^{\pm i\sqrt{z}x}$ y, por lo tanto, es suave. Afirmamos que el par w_0, w_1 es linealmente independiente. De lo contrario, w_0 satisfaría (3.24) en ambos extremos, lo que no es posible ya que z es estrictamente complejo.

Para soluciones de una EDO de segundo orden, el Wronskiano

$$W[w_0, w_1] := w_0w_1' - w_0'w_1, \quad (3.14)$$

está dado por una constante c_0 . La independencia lineal implica que $c_0 \neq 0$, permitiéndonos definir el núcleo integral

$$K(x, y) := \frac{1}{c_0} \begin{cases} w_0(x)w_1(y), & x \leq y, \\ w_0(y)w_1(x), & x \geq y. \end{cases} \quad (3.15)$$

3. Operadores

Para $f \in C^\infty[0, 1]$, un cálculo sencillo con el teorema fundamental del cálculo muestra que

$$u(x) := \int_0^1 K(x, y) f(y) dy \quad (3.16)$$

proporciona una solución de $u'' + zu = f$ con $u \in \mathcal{D}(L)$. Por lo tanto, f se encuentra en el rango de $L - z$. Dado que $C^\infty[0, 1]$ es denso en $L^2(0, 1)$, esto demuestra que $L - z$ tiene un rango denso. La misma construcción se aplica a $L - \bar{z}$, por lo que concluimos que L es esencialmente autoadjunto.

Extensión de Friedrichs

Para un operador simétrico positivo, comúnmente buscamos una extensión autoadjunta que también sea positiva. La observación al final de la sección anterior plantea la pregunta de si esto es posible. La respuesta es clara en el caso esencialmente autoadjunto, ya que la clausura de un operador positivo se muestra fácilmente como positiva. En el caso general no es tan obvio, pero, de hecho, las extensiones positivas existen en general.

Kurt Friedrichs resolvió este problema desarrollando un método de extensión basado en la forma cuadrática $u \mapsto \langle u, Au \rangle$ asociada a un operador positivo A . Cabe destacar que siempre podríamos desplazar un operador positivo por una constante, sin cambiar el dominio de la extensión. Por lo tanto, el contexto natural para el método de Friedrichs es un operador simétrico S que es semi-acotado, lo que significa que existe una constante $a \in \mathbb{R}$ tal que

$$\langle u, Su \rangle \geq a\|u\|^2$$

para todo $u \in \mathcal{H}$.

Teorema 3.5.3. Extensión de Friedrichs

supongamos que S es un operador simétrico en un espacio de Hilbert \mathcal{H} que es semi-acotado. Entonces, existe una extensión autoadjunta de S que satisface la misma cota.



Demostración. Sumando una constante a S , si es necesario, basta considerar el caso $a = 1$, donde S satisface

$$\langle u, Su \rangle \geq \|u\|^2.$$

Como S es simétrico, esto implica que la forma sesquilineal

$$Q[u, v] := \langle u, Sv \rangle$$

define un producto interno en $\mathcal{D}(S)$. Sea \mathcal{H}_Q la completación del espacio de Hilbert abstracto de $\mathcal{D}(S)$ con respecto a $Q[\cdot, \cdot]$. Los elementos de \mathcal{H}_Q son clases de equivalencia de secuencias en $\mathcal{D}(S)$ que son de Cauchy con respecto a la norma $\|\cdot\|_Q$ asociada a $Q[\cdot, \cdot]$. Nuestro objetivo es identificar \mathcal{H}_Q con un subespacio de \mathcal{H} . Primero notamos que la inclusión de $(\mathcal{D}(S), Q[\cdot, \cdot])$ en \mathcal{H} dada por el mapa identidad es continua, por la desigualdad anterior. Por lo tanto, admite una extensión única a un mapa lineal continuo $J : \mathcal{H}_Q \rightarrow \mathcal{H}$.

Afirmamos que J es inyectiva. Para demostrarlo, supongamos que $w \in \mathcal{H}_Q$ y $J(w) = 0$. Dado que $\mathcal{D}(S)$ está inmerso en \mathcal{H}_Q , podemos encontrar una secuencia

3.5. Criterios de Autoadjunción

$\{v_k\} \subset \mathcal{D}(S)$ tal que $v_k \rightarrow w$ en \mathcal{H}_Q . Por la continuidad, $J(v_k) \rightarrow J(w)$ en \mathcal{H} a medida que $k \rightarrow \infty$. Ya que $J(w) = 0$ y J se reduce a la identidad en $\mathcal{D}(S)$, esto implica que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|v_k\| = 0.$$

Usando el hecho de que el producto interno en \mathcal{H}_Q es una extensión continua de la forma sesquilineal Q , para $u \in \mathcal{D}(S)$ podemos calcular

$$\langle w, u \rangle_{\mathcal{H}_Q} = \lim_{k \rightarrow \infty} Q[v_k, u] = \lim_{k \rightarrow \infty} \langle v_k, Su \rangle.$$

Esto implica que $\langle w, u \rangle_{\mathcal{H}_Q} = 0$ para todo $u \in \mathcal{D}(S)$. Dado que $\mathcal{D}(S)$ es denso en \mathcal{H}_Q , se sigue que $w = 0$.

Usando el hecho de que J es inyectiva, podemos interpretar \mathcal{H}_Q como un subespacio de \mathcal{H} identificando $w \in \mathcal{H}_Q$ con $J(w) \in \mathcal{H}$. La extensión autoadjunta deseada A ahora puede definirse en el dominio

$$\mathcal{D}(A) := \{u \in \mathcal{H}_Q : |\langle u, v \rangle_{\mathcal{H}_Q}| \leq C\|v\| \text{ para todo } v \in \mathcal{H}_Q\}.$$

La condición sobre u implica que $v \mapsto \langle u, v \rangle_{\mathcal{H}_Q}$ se extiende a un funcional lineal acotado en \mathcal{H} . El lema de Riesz luego define un elemento único Au tal que

$$\langle u, v \rangle_{\mathcal{H}_Q} = \langle Au, v \rangle,$$

para todo $v \in \mathcal{H}_Q$. Es fácil comprobar que $u \mapsto Au$ es lineal, y la igualdad anterior implica que A es simétrico. Además, la desigualdad inicial implica que $S \subset A$.

Para ver que A es autoadjunto, utilizamos una variante del argumento del teorema mencionado anteriormente. Para $u \in \mathcal{H}$, el funcional $\langle u, \cdot \rangle$ es continuo en \mathcal{H}_Q , por la desigualdad. Ya que \mathcal{H}_Q es un espacio de Hilbert, el lema de Riesz proporciona $w \in \mathcal{H}_Q$ tal que

$$\langle u, v \rangle = \langle w, v \rangle_{\mathcal{H}_Q}$$

para todo $v \in \mathcal{H}_Q$. La condición sobre u implica que $w \in \mathcal{D}(A)$ y $Aw = u$. Ya que u era arbitrario, esto demuestra que A es sobreyectivo. Por otro lema, A^* es por lo tanto inyectivo.

Ahora consideremos $u \in \mathcal{D}(A^*)$. Por la sobreyectividad de A , tenemos $A^*u = Aw$ para algún $w \in \mathcal{D}(A)$. Ya que $A \subset A^*$, esto implica $A^*(u - w) = 0$. Por lo tanto, $u = w$, ya que A^* es inyectivo, lo que demuestra que $u \in \mathcal{D}(A)$. Esto establece la inclusión $\mathcal{D}(A^*) \subset \mathcal{D}(A)$, demostrando que A es autoadjunto. La igualdad entre $\langle u, Au \rangle$ y $\|u\|^2$ para todo $u \in \mathcal{D}(A)$ concluye la prueba. ■

La construcción de Friedrichs se puede aplicar de manera más general para construir un operador autoadjunto a partir de una forma cuadrática definida en un subespacio denso $\mathcal{H}_1 \subset \mathcal{H}$. Los requisitos para \mathcal{H}_1 en esta construcción son evidentes en la demostración. Necesitamos que \mathcal{H}_1 sea un espacio de Hilbert con respecto a $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}_1}$ y que la inclusión $\mathcal{H}_1 \rightarrow \mathcal{H}$ sea continua, lo que significa que existe $C > 0$ tal que

$$\|u\| \leq C\|u\|_{\mathcal{H}_1}$$

para todo $u \in \mathcal{H}_1$.

3. Operadores

Operadores Compactos

En 1916, Riesz observó que muchas características cualitativas del espectro de los operadores integrales podrían deducirse de una propiedad que él denominó "continuidad completa". La formulación moderna de esta condición es la siguiente:

Definición 3.5.1. Operador Compacto

Un operador T en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ es compacto si para cualquier secuencia acotada $\{u_k\} \subset \mathcal{H}$, la secuencia $\{Tu_k\}$ tiene una subsucesión convergente. 

Otra manera de expresar esto es que T mapea subconjuntos acotados a subconjuntos relativamente compactos. La misma definición también se aplica a mapas entre espacios de Banach, pero nuestro enfoque está en los operadores de espacio de Hilbert.

El ejemplo más básico de un operador compacto es un operador acotado de rango finito. Si $\{Tu_k\}$ es una secuencia acotada contenida en un subespacio de dimensión finita de \mathcal{H} , entonces el teorema de Bolzano-Weierstrass implica que $\{Tu_k\}$ tiene una subsucesión convergente. Por lo tanto, todos los operadores acotados de rango finito son compactos.

Se deduce directamente de la definición que la suma de operadores compactos es compacta. Además, si B es un operador acotado y T es compacto, entonces la continuidad de B implica que tanto BT como TB son compactos. Podemos resumir estas observaciones de la siguiente manera:

Lema 3.5.1. Algebra de Operadores Compactos

El conjunto de operadores compactos en \mathcal{H} forma un álgebra y un ideal bilátero dentro de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. 

Junto con estas propiedades algebraicas, tenemos un importante resultado analítico: los operadores compactos forman un subespacio cerrado con respecto a la topología del operador.

Teorema 3.5.4. Operadores Compactos y Convergencia

Si $\{T_n\}$ es una secuencia de operadores compactos en \mathcal{H} que converge (con respecto a la norma del operador) a un operador acotado T , entonces T es compacto. 

Demostración. Supongamos que $\{u_k\} \subset \mathcal{H}$ es una secuencia acotada y sea $M := \sup \|u_k\|$. Usando el hecho de que T_1 es compacto, podemos elegir una subsucesión $\{u_{1,k}\}$ para la cual $\{T_1 u_{1,k}\}$ es convergente. Luego podemos tomar $\{u_{2,k}\} \subset \{u_{1,k}\}$ de modo que $\{T_2 u_{2,k}\}$ converge, y así sucesivamente. El resultado es un conjunto anidado de subsucesiones $\{u_{m,k}\}$ para el cual $\{T_j u_{m,k}\}$ es convergente a medida que $k \rightarrow \infty$ para $m \geq j$.

Ahora consideremos la subsucesión diagonal $w_k := u_{k,k}$. Afirmamos que la secuencia de imágenes $\{Tw_k\}$ es de Cauchy. Para demostrarlo, elijamos $\varepsilon > 0$. Existe un n tal que

$$\|T_n - T\| \leq \varepsilon$$

por la convergencia de la norma $T_n \rightarrow T$. Para este valor de n ,

$$\|Tw_k - Tw_m\| \leq 2M\varepsilon + \|T_n w_k - T_n w_m\|$$

por la desigualdad triangular. La secuencia $\{T_j w_k\}$ es convergente por la construcción diagonal, y por lo tanto también de Cauchy. Por lo tanto, existe un $N > 0$ tal que para $k, m \geq N$,

$$\|T_n w_k - T_n w_m\| \leq \varepsilon.$$

Aplicando esto, obtenemos

$$\|T w_k - T w_m\| \leq (2M + 1)\varepsilon,$$

para $k, m \geq N$. Dado que M es fijo y ε es arbitrario, concluimos que $\{T w_k\}$ es de Cauchy, y por lo tanto convergente. ■

La estrecha conexión entre operadores compactos y operadores de rango finito se demuestra con el siguiente resultado. Nuestra prueba se limita a espacios de Hilbert separables por brevedad, pero el resultado se extiende al caso no separable.

Teorema 3.5.5. Caracterización de Operadores Compactos

Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert separable. Un operador T en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ es compacto si y solo si existe una secuencia de operadores acotados de rango finito $\{T_n\}$ tal que $\|T_n - T\| \rightarrow 0$.



Demostración. Dado que los operadores acotados de rango finito son compactos, los límites de secuencias de tales operadores con respecto a la topología de la norma del operador son compactos.

Para probar la inversa, supongamos que T es un operador compacto. Nuestro objetivo es construir una secuencia aproximada de operadores de rango finito. Esto es trivial si $\dim \mathcal{H} < \infty$, así que asumimos que $\dim \mathcal{H} = \infty$.

Existe una base ortonormal $\{e_j\}$ para \mathcal{H} . Sea P_n la proyección ortogonal sobre el espacio generado por $\{e_1, \dots, e_n\}$ y R_n la proyección ortogonal sobre $\{e_1, \dots, e_n\}^\perp$, de modo que $P_n + R_n = I$. Claramente $P_n T$ es acotado y de rango finito, así que podemos completar la prueba mostrando que $P_n T \rightarrow T$.

Para $v \in \mathcal{H}$,

$$\|R_n T v\|^2 = \sum_{j=n+1}^{\infty} |\langle e_j, T v \rangle|^2.$$

Tomando el supremo de ambos lados sobre $\|v\| = 1$ muestra que $\|R_n T\|$ disminuye a medida que $n \rightarrow \infty$. Esto significa que o bien $\|R_n T\| \rightarrow 0$ o $\|R_n T\| > \varepsilon$ para todos los n para algún $\varepsilon > 0$. Asumamos que se cumple lo último. Entonces, para cada n podemos elegir $v_n \in \mathcal{H}$ con $\|v_n\| = 1$ tal que

$$\|R_n T v_n\| \geq \varepsilon.$$

Por la compacidad de T , la secuencia $\{T v_n\}$ admite una subsucesión convergente: $T v_{n_k} \rightarrow w \in \mathcal{H}$ a medida que $k \rightarrow \infty$. Entonces,

$$\|R_{n_k} T v_{n_k}\| \leq \|R_{n_k} w\| + \|R_{n_k}(T v_{n_k} - w)\|,$$

y tomando $k \rightarrow \infty$ da

$$\varepsilon \leq \liminf_{k \rightarrow \infty} \|R_{n_k} w\|.$$

3. Operadores

Esto es una contradicción porque

$$\|R_{n_k} w\|^2 = \sum_{j>n_k} |\langle e_j, w \rangle|^2,$$

y por lo tanto $\|R_{n_k} w\| \rightarrow 0$ por la desigualdad de Bessel. Concluimos que $\|R_n T\| \rightarrow 0$, lo que demuestra que $P_n T \rightarrow T$. ■

Utilizando el Teorema, podemos desarrollar una caracterización equivalente de la compacidad, que a veces se toma como la definición.

Teorema 3.5.6. Compacidad y Secuencias Débilmente Convergentes

n operador acotado T en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ es compacto si y solo si T mapea secuencias débilmente convergentes a secuencias convergentes. ♡

Demostración. Supongamos primero que T es compacto y $\{u_k\} \subset \mathcal{H}$ es una secuencia que converge a w en sentido débil. Para cada $v \in \mathcal{H}$, la convergencia débil implica una cota

$$\sup_k |\langle u_k, v \rangle| < \infty.$$

Por lo tanto, por el teorema de acotamiento uniforme, existe $M > 0$ tal que

$$\|u_k\| \leq M$$

para todos los k . Dado $\varepsilon > 0$, el Teorema implica que existe un operador acotado de rango finito T_n tal que $\|T_n - T\| < \varepsilon$. Reemplazando T por T_n da

$$\|T(u_k - w)\| \leq \|T_n(u_k - w)\| + \varepsilon(M + \|w\|).$$

Como T_n es acotado y de rango finito, la convergencia débil $u_k \rightarrow w$ implica que $T_n(u_k - w) \rightarrow 0$ en norma. Así, tomando $k \rightarrow \infty$ da

$$\limsup_{k \rightarrow \infty} \|T(u_k - w)\| \leq \varepsilon(M + \|w\|).$$

Esto se cumple para todo $\varepsilon > 0$, lo que prueba que $Tu_k \rightarrow Tw$.

Para probar la otra dirección, asumimos que $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ mapea secuencias débilmente convergentes a secuencias fuertemente convergentes, y dejamos que $\{u_k\}$ sea una secuencia acotada en \mathcal{H} . El teorema de Alaoglu proporciona una subsucesión $\{u_{k_j}\}$ que converge débilmente a algún $w \in \mathcal{H}$. Por supuesto, el hecho de que $u_{k_j} - w \rightarrow 0$ en sentido débil implica la convergencia en norma $Tu_{k_j} \rightarrow Tw$. ■

Operadores de Hilbert-Schmidt

Los primeros operadores compactos que se estudiaron fueron operadores integrales de un tipo específico, introducidos por David Hilbert y Erhard Schmidt en 1907. Supongamos que (X, \mathcal{M}, μ) es un espacio de medida tal que $L^2(X, d\mu)$ es separable (por ejemplo, un subconjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ con medida de Lebesgue). Un operador de Hilbert-Schmidt en $L^2(X, d\mu)$ es un operador integral definido por

$$Tf(x) := \int_X K(x, y)f(y)d\mu(y),$$

3.5. Criterios de Autoadjunción

donde el núcleo integral satisface

$$K \in L^2(X \times X, d\mu \otimes d\mu).$$

La integral en el lado derecho se define para casi todo x . Para ver esto, nótese que

$$\int_X |K(x, y)f(y)|d\mu(y) \leq \|K(x, \cdot)\|_{L^2(X)}\|f\|$$

por la desigualdad de Cauchy-Schwarz. La función $|K(\cdot, \cdot)|^2$ es integrable en $X \times X$, por lo que $\|K(x, \cdot)\|_{L^2(X)} < \infty$ para casi todo x por el teorema de Fubini.

Teorema 3.5.7. Operadores de Hilbert-Schmidt y Compacidad

i T es un operador de Hilbert-Schmidt con núcleo integral K, entonces

$$\|T\| \leq \|K\|_{L^2(X \times X)},$$

y T es compacto.



Demostración. La estimación de la norma del operador se sigue al cuadrar la integral y luego integrar:

$$\|Tf\|^2 = \int_X \left(\int_X |K(x, y)f(y)|d\mu(y) \right)^2 d\mu(x) \leq \int_X \|K(x, \cdot)\|_{L^2(X)}^2 \|f\|^2 d\mu(x) = \|K\|_{L^2(X \times X)}^2 \|f\|^2.$$

Por la suposición de que $L^2(X, d\mu)$ es separable, existe una base ortonormal $\{\phi_k\}$. Es fácil verificar que $\{\phi_j \otimes \overline{\phi_k}\}$ proporciona una base correspondiente para $L^2(X \times X, d\mu \otimes d\mu)$. En términos de esta base, K tiene la expansión

$$K(x, y) = \sum_{j,k} a_{jk} \phi_j(x) \overline{\phi_k(y)},$$

convergiendo en el sentido L^2 , donde

$$a_{jk} := \langle \phi_j, T\phi_k \rangle.$$

Por un teorema anterior,

$$\|K\|_{L^2(X \times X)}^2 = \sum_{j,k} |a_{jk}|^2.$$

La expansión de la base proporciona una aproximación natural de rango finito y acotada T_N , con núcleo integral

$$K_N(x, y) := \sum_{j,k=1}^N a_{jk} \phi_j(x) \overline{\phi_k(y)}.$$

Por la estimación utilizada anteriormente,

$$\|T - T_N\|^2 \leq \|K - K_N\|_{L^2(X \times X)}^2 = \sum_{j,k > N} |a_{jk}|^2.$$

Esto es la cola de una serie convergente, implicando que $\|T - T_N\| \rightarrow 0$ a medida que $N \rightarrow \infty$. ■

3. Operadores

Ejemplo 3.5.1. Operador de Integración en $L^2(0,1)$

en $L^2(0,1)$, consideremos el operador de integración T , dado por

$$Tf(x) := \int_0^x f(y)dy.$$

Esto se puede escribir como un operador integral con el núcleo,

$$K(x,y) = \begin{cases} 1, & x \leq y, \\ 0, & x > y. \end{cases}$$

Claramente $K \in L^2((0,1) \times (0,1))$, por lo que T es un operador de Hilbert-Schmidt y, por lo tanto, compacto. ◇

Si T tiene un núcleo integral K , entonces la norma L^2 de K se denomina la norma de Hilbert-Schmidt de T . La fórmula permite extender esta noción a operadores en un espacio de Hilbert separable abstracto \mathcal{H} . Decimos que $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es de Hilbert-Schmidt si, para una base ortonormal $\{\phi_k\}$,

$$\|T\|_{\text{HS}}^2 := \sum_{j,k} |\langle \phi_j, T\phi_k \rangle|^2 < \infty.$$

(En el caso de matrices de dimensión finita, esto se denomina norma de Frobenius.) Para operadores integrales, esta suma es independiente de la elección de la base ortonormal. Esto sigue siendo cierto para cualquier operador compacto, aunque la demostración no es tan obvia.

CAPÍTULO 4

Espectro y Resolvente

4.1. Introducción al Espectro y Resolvente

David Hilbert fue el primero en usar el término "espectro" para describir el conjunto de autovalores de un operador lineal, en una serie de trabajos que comenzaron en 1904. Aparentemente, fue motivado por una analogía suelta entre los conjuntos discretos de autovalores de ciertos operadores integrales y las líneas espectrales atómicas descubiertas por los físicos en el siglo XIX. Notablemente, la analogía de Hilbert se convirtió en un vínculo directo solo unas décadas después, en el cálculo innovador de las líneas espectrales del átomo de hidrógeno por Erwin Schrödinger en 1926. (Veremos este cálculo en la Sección 7.4).

El espectro de una matriz M es el conjunto de sus autovalores (otro término acuñado por Hilbert). Los autovalores fueron originalmente definidos por Augustin-Louis Cauchy como las raíces del polinomio característico, $q(z) := \det(M - zI)$. Dado que $q(\lambda) = 0$ precisamente cuando $M - \lambda I$ no es invertible, cada autovalor está asociado con un autovector, un vector no nulo v para el cual $Mv = \lambda v$.

En el caso de los operadores, el determinante no está generalmente definido, así que definimos el espectro en términos de la invertibilidad de $T - z$, para $z \in \mathbb{C}$. (Para simplificar la notación, un número que aparece en una fórmula de operador se interpreta como un múltiplo de la identidad, de modo que $T - z$ representa $T - zI$). Todavía tiene sentido definir autovalores en términos de la existencia de un autovector. Esto no da todo el espectro, sin embargo, porque no existe un teorema de rango-nulo en el caso infinito-dimensional. El operador $T - \lambda$ podría no ser invertible incluso cuando $T - \lambda$ es inyectivo y por lo tanto no hay autovector para λ .

4.2. Definiciones y Ejemplos

Definición 4.2.1. Espectro y Resolvente

Sea T un operador en un espacio de Hilbert \mathcal{H} , posiblemente no acotado. Un **autovalor** de T es un número $\lambda \in \mathbb{C}$ para el cual existe un correspondiente autovector $\phi \in \mathcal{D}(T) \setminus \{0\}$, tal que

$$T\phi = \lambda\phi.$$

4. Espectro y Resolvente

El conjunto de autovalores se llama el **espectro puntual** y se denota por $\sigma_{pt}(T)$. Cada autovalor lleva una multiplicidad, definida como la dimensión del espacio de autovectores que comparten el mismo autovalor. El **espectro** $\sigma(T)$ es el conjunto de puntos $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales $T - \lambda$ no tiene una inversa acotada. El complemento del espectro es el conjunto resolvente, denotado por $\rho(T)$. El operador acotado $(T - z)^{-1}$ se llama la **resolvente** de T en $z \in \rho(T)$.



Ejemplo 4.2.1. Operador Diferencial

Consideremos el operador diferencial $T := -i \frac{d}{dx}$ del Ejemplo 3.21, que fue considerado autoadjunto en $L^2(0, 1)$ con el dominio $\mathcal{D}(T)$ consistiendo en funciones absolutamente continuas que satisfacen condiciones de frontera periódicas. Este operador tiene las evidentes autofunciones,

$$\phi_k(x) := e^{2\pi i k x}$$

para $k \in \mathbb{Z}$. Las autofunciones constituyen una base ortonormal para $L^2(0, 1)$, por los argumentos de la base de Fourier del Ejemplo 2.32. Para $z \in \mathbb{C} \setminus (2\pi\mathbb{Z})$, podemos definir la resolvente por

$$(T - z)^{-1} : \phi_k \mapsto (2\pi k - z)^{-1} \phi_k.$$

El operador $(T - z)^{-1}$ es así acotado, con norma

$$\|(T - z)^{-1}\| = \frac{1}{\text{dist}(z, 2\pi\mathbb{Z})}.$$

Por lo tanto, $\rho(T) = \mathbb{C} \setminus (2\pi\mathbb{Z})$ y

$$\sigma(T) = \sigma_{pt}(T) = 2\pi\mathbb{Z}.$$



4.3. Propiedades Básicas del Espectro

Para operadores acotados, podemos utilizar la norma del operador para estimar el espectro al elaborar una fórmula para $(T - z)^{-1}$ cuando $|z| > \|T\|$.

Lema 4.3.1. Acotación del Espectro para Operadores Acotados

Para un operador acotado T ,

$$\sigma(T) \subset \{z \in \mathbb{C} : |z| \leq \|T\|\}.$$



Demostración. Para $|z| > \|T\|$, la serie

$$S := \sum_{k=0}^{\infty} z^{-k} T^k$$

converge absolutamente en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, y por lo tanto define un operador acotado.

4.3. Propiedades Básicas del Espectro

Claramente T conmuta con S , y la identidad obvia,

$$TS = z(S - I),$$

implica que

$$(T - z)S = -z.$$

Por lo tanto, $T - z$ tiene una inversa acotada y $z \in \rho(T)$. ■

En secciones posteriores, estudiaremos el operador resolvente en mayor detalle y lo utilizaremos para desarrollar una mejor comprensión del espectro. Antes de adentrarnos en este análisis, es útil observar que la resolvente y el espectro se comportan de manera natural con respecto a los adjuntos. Definamos la imagen de un subconjunto $W \subset \mathbb{C}$ bajo conjugación compleja por

$$W^* := \{z \in \mathbb{C} : \bar{z} \in W\}.$$

Teorema 4.3.1. Espectro y Resolvente de Operadores Adjoint

Para un operador cerrado T ,

$$\sigma(T^*) = \sigma(T)^* \quad \text{y} \quad \rho(T^*) = \rho(T)^*.$$

Si $z \in \rho(T)$, entonces

$$[(T - z)^{-1}]^* = (T^* - \bar{z})^{-1}.$$

Demostración. Basta demostrar que $\rho(T)^* \subset \rho(T^*)$. Esto implicará $\rho(T^*) \subset \rho(T)^*$ también, ya que $T^{**} = T$ para un operador cerrado. Supongamos que $z \in \rho(T)$. Para $v \in \mathcal{H}$ y $w \in \mathcal{D}(T^*)$,

$$\begin{aligned} \langle v, w \rangle &= \langle (T - z)(T - z)^{-1}v, w \rangle \\ &= \langle (T - z)^{-1}v, (T^* - \bar{z})w \rangle \\ &= \langle v, [(T - z)^{-1}]^*(T^* - \bar{z})w \rangle. \end{aligned}$$

Ya que v y w son arbitrarios, esto muestra que

$$[(T - z)^{-1}]^*(T^* - \bar{z}) = I, \quad \text{en } \mathcal{D}(T^*).$$

Un argumento similar muestra que

$$(T^* - \bar{z})[(T - z)^{-1}]^* = I, \quad \text{en } \mathcal{H}.$$

Por lo tanto, $\bar{z} \in \rho(T^*)$ y se cumple la relación. ■

Espectro del Operador de Multiplicación

Los operadores de multiplicación introducidos en el Ejemplo ?? jugarán un papel fundamental en el teorema espectral desarrollado en el Capítulo ??, de manera análoga al papel desempeñado por las matrices diagonales en álgebra lineal.

4. Espectro y Resolvente

Recordemos cómo se define un operador de multiplicación para un espacio de medida σ -finita (X, \mathcal{M}, μ) . Asociado con una función medible $f : X \rightarrow \mathbb{C}$ se encuentra un operador

$$M_f : u \mapsto fu,$$

que actúa en el espacio de Hilbert $L^2(X, d\mu)$. Este operador está acotado, con norma $\|M_f\| = \|f\|_\infty$, si y solo si $f \in L^\infty(X, d\mu)$. De lo contrario, M_f se define como un operador no acotado en el dominio

$$\mathcal{D}(M_f) := \{u \in L^2(X, d\mu) : fu \in L^2(X, d\mu)\}.$$

El resolvente $(M_f - z)^{-1}$ en un punto $z \in \mathbb{C}$ será claramente dado por el operador de multiplicación correspondiente a $(f - z)^{-1}$, siempre que esto esté acotado. Por lo tanto, $z \in \rho(M_f)$ si y solo si $(f - z)^{-1} \in L^\infty(X, d\mu)$. El espectro de M_f está así estrechamente relacionado con el rango de f . Para describirlo con precisión, introducimos la noción del rango esencial de f (con respecto a μ), definido por

$$\text{ess-range } f := \{z \in \mathbb{C} : \mu(f^{-1}(B(z; \varepsilon))) > 0 \text{ para todo } \varepsilon > 0\}.$$

Este concepto es bastante similar al supremo esencial; ambas nociones permanecen sin cambios cuando la función se modifica en un conjunto de medida cero. Es importante notar que para una función continua en \mathbb{R}^n , el rango esencial (con respecto a la medida de Lebesgue) no es el rango en sí, sino más bien su clausura.

Teorema 4.3.2. Espectro del Operador de Multiplicación M_f

Para un operador de multiplicación M_f en $L^2(X, d\mu)$,

$$\sigma(M_f) = \text{ess-range } f.$$

Si $z \in \rho(M_f)$, entonces

$$\|(M_f - z)^{-1}\| = \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(M_f))}.$$

Además, $\lambda \in \mathbb{C}$ es un valor propio de M_f si y solo si $\mu(f^{-1}\{\lambda\}) > 0$. ♥

Demostración. Si $\lambda \in \text{ess-range}(f)$, entonces para todo $\varepsilon > 0$, tenemos $|f - \lambda| < \varepsilon$ en un conjunto de medida positiva. Esto significa que

$$\|(f - \lambda)^{-1}\|_\infty = \infty.$$

Por lo tanto, $M_f - \lambda$ no tiene inverso acotado y, por lo tanto, $\lambda \in \sigma(M_f)$. Esto establece

$$\text{ess-range}(f) \subset \sigma(M_f).$$

Ahora supongamos que $z \notin \text{ess-range}(f)$. Para $r < \text{dist}(z, \text{ess-range}(f))$, esto implica que

$$\mu(f^{-1}B(z; r)) = 0.$$

En otras palabras, $|f(x) - z| \geq r$ para casi todo $x \in X$, lo que implica que

$$\|(f - z)^{-1}\|_\infty \leq r^{-1},$$

4.3. Propiedades Básicas del Espectro

y por lo tanto $z \in \rho(M_f)$. En vista del Teorema ??, esto demuestra

$$\text{ess-range}(f) \subset \sigma(M_f).$$

A partir de aquí, también obtenemos la estimación del resolvente,

$$\|(M_f - z)^{-1}\| \leq \text{dist}(z, \sigma(M_f))^{-1}.$$

Si $r > \text{dist}(z, \text{ess-range}(f))$, entonces $|f - z| < r$ en un conjunto de medida positiva, y por lo tanto

$$\|(f - z)^{-1}\|_\infty \geq r^{-1}.$$

Por lo tanto, se cumple la igualdad en la estimación del resolvente.

Finalmente, probemos la caracterización de un valor propio. Supongamos que $\phi \in L^2(X, d\mu)$ satisface la ecuación de valor propio,

$$(M_f - \lambda)\phi = 0.$$

En otras palabras, $(f - \lambda)\phi = 0$ casi en todas partes en X . Si $\mu(f^{-1}\{\lambda\}) = 0$, entonces la ecuación de valor propio implica que $\phi = 0$ casi en todas partes. Por lo tanto, una solución no trivial de la ecuación de valor propio es posible solo si $\mu(f^{-1}\{\lambda\}) > 0$. A la inversa, si $\mu(f^{-1}\{\lambda\}) > 0$, entonces existe un conjunto $E \subset f^{-1}\{\lambda\}$ con $0 < \mu(E) < \infty$. Establecer $\phi = \chi_E$ proporciona una función propia para λ . ■

Resolvente del Laplaciano Euclidiano

Vimos en el Ejemplo que el Laplaciano en \mathbb{R}^n es autoadjunto con dominio dado por el espacio de Sobolev $\mathcal{D}(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n)$. Además, $-\Delta$ es unitariamente equivalente a la multiplicación por $|\xi|^2$, bajo la transformada de Fourier. Por lo tanto, por el Teorema ??,

$$\sigma(-\Delta) = [0, \infty)$$

La equivalencia unitaria con $M_{|\xi|^2}$ también nos permite trabajar una fórmula explícita para el resolvente, lo cual será útil más adelante. Por conveniencia, escribimos el parámetro espectral como $z = -\kappa^2$, de modo que $\text{Re } \kappa > 0$ corresponde al conjunto resolvente. Nuestro objetivo es invertir el operador $-\Delta + \kappa^2$.

Por simetría, el núcleo integral de $(-\Delta + \kappa^2)^{-1}$ debe depender solo de la distancia entre puntos, por lo que buscamos una función $G(\kappa; r)$ tal que

$$(-\Delta + \kappa^2)^{-1} f(x) = \int_{\mathbb{R}^n} G(\kappa; |x - y|) f(y) d^n y,$$

para $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$. El núcleo integral G se llama función de Green (o solución fundamental) para el operador $-\Delta + \kappa^2$. Para resolver esta ecuación, aplicamos la transformada de Fourier a la expresión de la izquierda, obteniendo

$$\mathcal{F} \left[(-\Delta + \kappa^2)^{-1} f \right] (\xi) = \frac{\hat{f}(\xi)}{|\xi|^2 + \kappa^2}.$$

4. Espectro y Resolvente

La transformada de Fourier inversa nos da entonces

$$(-\Delta + \kappa^2)^{-1} f(x) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{ix \cdot \xi} \frac{\hat{f}(\xi)}{|\xi|^2 + \kappa^2} d^n \xi.$$

Para calcular la integral restante, escribimos

$$\frac{1}{|\xi|^2 + \kappa^2} = \int_0^\infty e^{-t(|\xi|^2 + \kappa^2)} dt,$$

para $\text{Re } \kappa^2 > 0$. Aplicando esto a la ecuación anterior y utilizando la definición de \hat{f} , obtenemos la función de Green buscada con

$$G(\kappa; |x - y|) := (2\pi)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} \int_0^\infty e^{i(x-y) \cdot \xi - t(|\xi|^2 + \kappa^2)} d^n \xi dt$$

(donde el cambio en el orden de integración está justificado por el teorema de Fubini). La integral sobre ξ es ahora una transformada de Fourier gaussiana estándar,

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{i(x-y) \cdot \xi - t|\xi|^2} d^n \xi = \left(\frac{\pi}{t}\right)^{\frac{n}{2}} e^{-|x-y|^2/4t}.$$

Insertando esto de vuelta en la expresión para G nos da

$$\begin{aligned} G(\kappa; r) &= (4\pi)^{-\frac{n}{2}} \int_0^\infty t^{-\frac{n}{2}} e^{-\kappa^2 t - r^2/4t} dt \\ &= (4\pi)^{-\frac{n}{2}} \kappa^{n-2} \int_0^\infty t^{-\frac{n}{2}} e^{-t - \kappa^2 r^2/4t} dt. \end{aligned}$$

Esta expresión para $G(\kappa; r)$ se puede comparar con una fórmula estándar para la función Bessel modificada [64, Ec. (10.32.10)],

$$K_\nu(w) := \frac{1}{2} \left(\frac{w}{2}\right)^\nu \int_0^\infty t^{-\nu-1} e^{-t-w^2/4t} dt,$$

válida para $v \in \mathbb{C}$ y $|\arg w| < \pi/4$. Estableciendo $w = \kappa r$ nos da

$$G(\kappa; r) = (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \left(\frac{r}{\kappa}\right)^{1-\frac{n}{2}} K_{\frac{n}{2}-1}(\kappa r).$$

Aunque asumimos $\text{Re } \kappa^2 > 0$ para el cálculo, ahora podemos recurrir a la ecuación de Bessel para verificar que la fórmula se extiende al conjunto resolvente completo $\text{Re } \kappa > 0$. Para $n = 3$, la fórmula se simplifica a

$$G(\kappa; r) = \frac{1}{4\pi} \frac{e^{-\kappa r}}{r}.$$

La función de Green clásica es el núcleo integral para $(-\Delta)^{-1}$. Esto se puede recuperar de la fórmula tomando formalmente $\kappa \rightarrow 0$. Utilizando las asintóticas bien conocidas de $K_\nu(w)$ cuando $w \rightarrow 0$, obtenemos

$$G(0; r) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi} \log r, & n = 2, \\ \frac{1}{4} \pi^{-\frac{n}{2}} \Gamma\left(\frac{n}{2} - 1\right) r^{2-n}, & n \geq 3. \end{cases}$$

La existencia de $G(0; r)$ como un núcleo integral para $(-\Delta)^{-1}$ no contradice el hecho de que $0 \in \sigma(-\Delta)$, porque estos núcleos no definen operadores acotados en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Laplacianos Discretos

Como una última clase de ejemplos, consideramos algunos operadores en el espacio de Hilbert discreto $\ell^2(\mathbb{Z}^n)$ que surgen en el contexto de la física del estado sólido.

Para definir un análogo discreto del Laplaciano, comenzamos escribiendo el Laplaciano unidimensional como el límite de un cociente de diferencias,

$$-\Delta f(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{2f(x) - f(x+h) - f(x-h)}{h^2}.$$

Esta fórmula sugiere que el análogo discreto del Laplaciano en una red regular debería definirse congelando h en un valor no nulo igual al espaciado de la red. Por ejemplo, en $\ell^2(\mathbb{Z}^n)$ estableceríamos $h = 1$ y definiríamos

$$-\Delta_{\mathbb{Z}^n} f(k) := \sum_{m \in \mathbb{Z}^n: |k-m|=1} (f(k) - f(m)).$$

Nótese que la suma es finita. Para cada $k \in \mathbb{Z}^n$, incluye los $2n$ vecinos más cercanos en la red. Es claro a partir de la desigualdad triangular que

$$\|-\Delta_{\mathbb{Z}^n}\| \leq 4n.$$

Por lo tanto, podemos ver que $-\Delta_{\mathbb{Z}^n}$ es autoadjunto solo verificando simetría,

$$\begin{aligned} \langle f, -\Delta_{\mathbb{Z}^n} g \rangle &= \sum_{k, m: |k-m|=1} \overline{f(k)} (g(k) - g(m)) \\ &= \sum_{k, m: |k-m|=1} \overline{(f(m) - f(k))} g(m) \\ &= \langle -\Delta_{\mathbb{Z}^n} f, g \rangle. \end{aligned}$$

Para determinar el espectro de $-\Delta_{\mathbb{Z}^n}$, utilizamos la transformada de Fourier discreta $\mathcal{F}: L^2(\mathbb{T}^n) \rightarrow \ell^2(\mathbb{Z}^n)$, dada por

$$\mathcal{F}[h](k) = (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{T}^n} e^{-ik \cdot \theta} h(\theta) d^n \theta,$$

donde $\mathbb{T}^n := (\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z})^n$. Este mapeo es unitario, con inversa dada por la serie de Fourier,

$$\mathcal{F}^*[f](\theta) = (2\pi)^{-n/2} \sum_{k \in \mathbb{Z}^n} e^{ik \cdot \theta} f(k).$$

Para $g \in L^2(\mathbb{T}^n)$, calculamos

$$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbb{Z}^n} \mathcal{F}[g](k) &= \sum_{|k-m|=1} (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{T}^n} (e^{-ik \cdot \theta} - e^{-im \cdot \theta}) g(\theta) d^n \theta \\ &= (2\pi)^{-n/2} \int_{\mathbb{T}^n} e^{-ik \cdot \theta} \sum_{j=1}^n (2 - e^{-i\theta_j} - e^{i\theta_j}) g(\theta) d^n \theta \\ &= \sum_{j=1}^n \mathcal{F}[(2 - 2 \cos \theta_j) g](k). \end{aligned}$$

4. Espectro y Resolvente

Así, \mathcal{F} proporciona una equivalencia unitaria entre $-\Delta_{\mathbb{Z}^n}$ y el operador de multiplicación M_H actuando en $L^2(\mathbb{T}^n)$, para la función

$$H(\theta) := \sum_{j=1}^n (2 - 2 \cos \theta_j).$$

Se sigue del Teorema ?? que

$$\sigma(-\Delta_{\mathbb{Z}^n}) = [0, 4n].$$

Los operadores discretos como $-\Delta_{\mathbb{Z}^n}$ se utilizan con frecuencia como modelos para problemas en cristalografía. Estos modelos son altamente simplificados desde un punto de vista físico, y sin embargo, su comportamiento matemático puede ser extremadamente complejo. Uno de los ejemplos más famosos de esta complejidad surge como un modelo discreto para el problema de electrones en una red bidimensional, sujeto a un campo magnético constante aplicado perpendicularmente a la red. El físico P. G. Harper propuso en 1955 [42] modelar este sistema utilizando un operador Hamiltoniano cuántico H_α actuando en $\ell^2(\mathbb{Z}^2)$, dado por

$$\begin{aligned} H_\alpha u(m_1, m_2) := & u(m_1 + 1, m_2) + u(m_1 - 1, m_2) \\ & + e^{-2\pi i \alpha m_1} u(m_1, m_2 + 1) + e^{2\pi i \alpha m_1} u(m_1, m_2 - 1), \end{aligned}$$

donde $\alpha \in [0, 1]$. El parámetro α representa la intensidad del campo magnético. Es fácil comprobar que H_α es acotado y autoadjunto. El caso $\alpha = 0$ se reduce a $H_0 = \Delta_{\mathbb{Z}^2} + 4$.

El modelo de Harper es relativamente fácil de analizar cuando α es racional. Si $\alpha = p/q$ con $p, q \in \mathbb{N}$, entonces H_α es periódico en ambas dimensiones, con una celda fundamental de tamaño $q \times 1$, como se ilustra en la Figura 4.1. Para analizar el espectro, podemos adaptar la transformada de Fourier discreta a esta estructura periódica. Definimos el mapa $U : \ell^2(\mathbb{Z}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{T}^2, \mathbb{C}^q)$ por

$$(Uf)_j(\theta) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k \in \mathbb{Z}^2} e^{-ik \cdot \theta} f(j - 1 + qk_1, k_2).$$

Nótese que la componente j -ésima de Uf es la transformada de Fourier estándar de la restricción de f al sitio j -ésimo en cada celda. Este mapa U es un caso especial de la transformada de Floquet (también llamada Bloch-Floquet), que es una herramienta fundamental en la teoría espectral periódica. La Figura 4.1 muestra la celda fundamental para H_α cuando $q = 5$. Es fácil comprobar que U es unitario. Para definir su inversa, escribimos

$$U^*g(m_1, m_2) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} e^{ik\theta_1 + im_2\theta_2} g_j(\theta) d^2\theta,$$

donde $m_1 = j - 1 + qk$, con $k \in \mathbb{Z}$ y $j = 0, 1, \dots, q - 1$. La fórmula de inversión para series de Fourier implica que $U^* = U^{-1}$.

Podemos calcular el espectro de H_α (aún asumiendo $\alpha = p/q$) computando $UH_\alpha U^*$. Es útil escribir H_α en términos de operadores de desplazamiento, como

$$H_\alpha = S_1 + S_1^* + e^{-2\pi i p m_1 / q} S_2 + e^{2\pi i p m_1 / q} S_2^*,$$

4.3. Propiedades Básicas del Espectro

donde

$$S_1 u(m_1, m_2) := u(m_1 + 1, m_2), \quad S_2 u(m_1, m_2) := u(m_1, m_2 + 1).$$

Bajo la conjugación por U , S_2 se comporta como un desplazamiento ordinario de series de Fourier,

$$US_2U^*g(\theta) = e^{i\theta_2}g(\theta).$$

La acción de S_1 es un poco más complicada. Estableciendo $m_1 = j - 1 + qk$ como arriba, tenemos

$$\begin{aligned} (S_1U^*g)(\theta) &= U^*g(j + qk) \\ &= \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} e^{ik\theta_1 + im_2\theta_2} g_{j+1}(\theta) d^2\theta, & j < q, \\ \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} e^{i(k+1)\theta_1 + im_2\theta_2} g_1(\theta) d^2\theta, & j = q. \end{cases} \end{aligned}$$

Aplicando U entonces da

$$(US_1U^*g)j(\theta) = \begin{cases} g_{j+1}(\theta), & j < q, \\ e^{i\theta_1}g_1(\theta), & j = q. \end{cases}$$

Usando las relaciones anteriores junto con la definición de H_α , podemos ver que U conjugate H_α a un operador de multiplicación matricial \tilde{A} en $L^2(\mathbb{T}^2, \mathbb{C}^q)$. Esto tiene la forma

$$[\tilde{A}g]_i(\theta) = \sum_{j=1}^q A_{ij}(\theta)g_j(\theta),$$

donde $A(\theta)$ es la función matricial autoadjunta

$$A(\theta) := \begin{pmatrix} 0 & e^{i\theta_1} \\ I_{q-1} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & I_{q-1} \\ e^{-i\theta_1} & 0 \end{pmatrix} + D(\theta_2),$$

con I_{q-1} la matriz identidad de dimensión $(q-1)$, y $D(\theta_2)$ la matriz diagonal $q \times q$ dada por

$$[D(\theta_2)]_{ij} = 2 \cos\left(\frac{2\pi(j-1)p}{q} - \theta_2\right) \delta_{ij}.$$

Utilizando la continuidad de $A(\theta)$ y la compacidad de \mathbb{T}^2 , es sencillo comprobar que $\tilde{A} - \lambda$ es invertible si y solo si la matriz 2×2 $A(\theta) - \lambda$ es invertible para todos $\theta \in \mathbb{T}^2$. Por lo tanto, para $\alpha = p/q$ podemos concluir que

$$\sigma(H_\alpha) = \bigcup_{\theta \in \mathbb{T}^2} \sigma(A(\theta)).$$

Por ejemplo, en el caso $p = 1$ y $q = 2$,

$$A(\theta) = \begin{pmatrix} 2 \cos \theta_2 & 1 + e^{i\theta_1} \\ 1 + e^{-i\theta_1} & -2 \cos \theta_2 \end{pmatrix}.$$

Los autovalores de $A(\theta)$ son

$$\lambda_{\pm}(\theta) = \pm \sqrt{2 + 2 \cos(\theta_1) + 4 \cos^2(\theta_2)},$$

4. Espectro y Resolvente

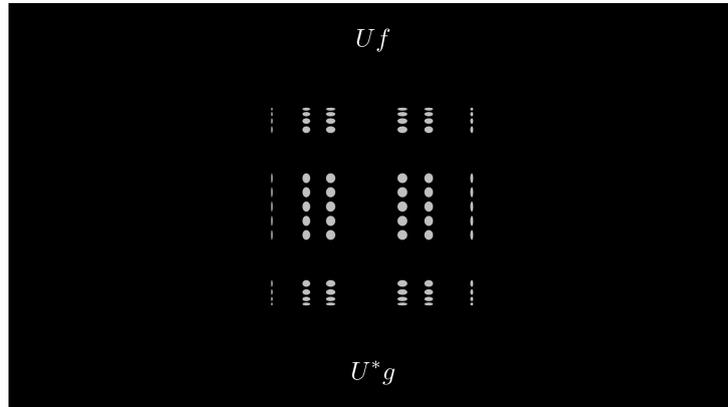


Figura 4.1: Celda fundamental para H_α cuando $q = 5$.

y por lo tanto

$$\sigma(H_{1/2}) = [-\sqrt{8}, \sqrt{8}].$$

En su tesis doctoral de 1976, Douglas Hofstadter realizó cálculos numéricos que desvelaron por primera vez la compleja estructura de $\sigma(H_\alpha)$ para valores racionales de α . Su trabajo incluyó un gráfico bidimensional de estos espectros, ahora conocido como la "mariposa de Hofstadter", ilustrada en la Figura 4.2. Este gráfico muestra la posibilidad de una extrema inestabilidad del espectro bajo perturbaciones. Uno podría pensar que la intrincada estructura de las bandas espectrales es un artefacto del modelo simplificado de Harper. Sin embargo, en 2013, tales patrones fueron observados en la naturaleza por varios grupos de investigación independientes. Estos experimentos involucraron grafeno, un material exótico compuesto por átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal bidimensional de un solo átomo de espesor.

Determinar el espectro de H_α para α irracional es un problema mucho más difícil que el cálculo usado para crear la Figura 4.2. El trabajo de Hofstadter dio soporte a una conjetura anterior de Mark Azbel de que $\sigma(H_\alpha)$ es un conjunto de Cantor para valores irracionales de α , y por lo tanto, tiene medida cero. Esta conjetura, posteriormente popularizada por Mark Kac y Barry Simon como el problema del "ten-martini", sigue siendo un área de investigación activa en el estudio de los sistemas cuánticos y la teoría espectral.

4.4. Resolvente

Para una matriz, el hecho de que el espectro pueda definirse como las raíces del polinomio característico nos permite aplicar herramientas poderosas del análisis complejo a preguntas espectrales. Por ejemplo, la existencia de valores propios se sigue del teorema de Liouville, a través del teorema fundamental del álgebra.

Para un operador general no hay un análogo directo del polinomio característico. Sin embargo, aún podemos traer el análisis complejo a la imagen interpretando el resolvente como una función holomorfa del parámetro espectral.

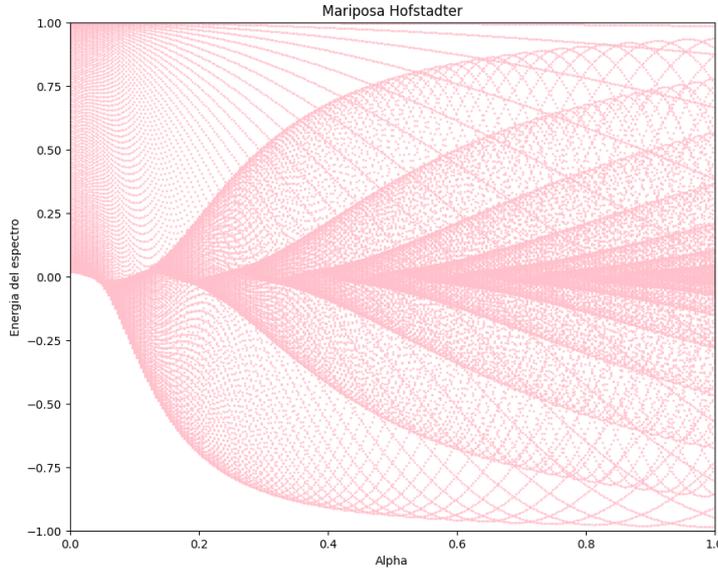


Figura 4.2: La mariposa de Hofstadter: El espectro de H_α se representa horizontalmente para valores racionales de α que varían de 0 a 1 en el eje vertical. Gráfico de autoría propia.

Funciones Analíticas de Operadores con Valor

Para establecer nuestro análisis del resolvente, primero desarrollamos algunas teorías básicas de familias analíticas de operadores acotados. A lo largo de esta discusión, usaremos Ω para denotar un subconjunto abierto y conectado de \mathbb{C} .

Definición 4.4.1. Mapa Analítico

Un mapa $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es analítico si para cada $z_0 \in \Omega$ existe una secuencia de operadores acotados $\{A_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathcal{L}(\mathcal{H})$ y $r_0 > 0$ tal que

$$F(z) = \sum_{n=1}^{\infty} (z - z_0)^n A_n,$$

con la serie convergiendo absolutamente para $|z - z_0| < r_0$.

Por el test de la raíz, el radio de convergencia absoluto de la serie de potencias es

$$r_0 = \left(\limsup_{n \rightarrow \infty} \|A_n\|^{\frac{1}{n}} \right)^{-1}.$$

En particular, esto significa que para $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, la serie geométrica,

$$(I - zT)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n T^n,$$

es convergente para $|z| < \|T\|^{-1}$. Una expansión de operador de la forma es llamada una serie de Neumann. Es fácil verificar que $(I - zT)^{-1}$ es analítica en

4. Espectro y Resolvente

cada punto $z_0 \in \{|z| < \|T\|^{-1}\}$, usando una expansión de serie geométrica:

$$\begin{aligned} (I - zT)^{-1} &= [(I - z_0T) - (z - z_0)T]^{-1} \\ &= (I - z_0T)^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} (z - z_0)^k [T(I - z_0T)^{-1}]^k, \end{aligned}$$

para $|z - z_0|$ suficientemente pequeño.

Como en el caso escalar, la analiticidad de operadores con valor está relacionada con la existencia de una derivada compleja. Una función $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es holomorfa si el límite

$$F'(z) := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{F(z+h) - F(z)}{h},$$

existe (en la topología de la norma del operador) para cada $z \in \Omega$. Para hacer la conexión entre funciones holomorfas y analíticas, podemos usar integrales de contorno con valor de operador.

Para mantener breve esta discusión, solo definiremos integrales de contorno en un sentido débil. Decimos que $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es débilmente continua si la función $z \mapsto \langle v, F(z)w \rangle$ es continua para cada $v, w \in \mathcal{H}$.

Lema 4.4.1. Integral de Contorno Débil

Suponga que $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es débilmente continua, y sea γ una curva cerrada y suave por partes en Ω . Hay un único operador acotado, denotado por

$$T := \int_{\gamma} F(z) dz$$

tal que

$$\langle v, Tw \rangle = \int_{\gamma} \langle v, F(z)w \rangle dz$$

para todos $v, w \in \mathcal{H}$. Además,

$$\|T\| \leq \ell(\gamma) \sup_{z \in \gamma} \|F(z)\|.$$



Demostración. El formulario sesquilineal,

$$q(v, w) := \int_{\gamma} \langle v, F(z)w \rangle dz,$$

está bien definido por la suposición de continuidad débil. Además, ya que γ es compacto,

$$\sup_{z \in \gamma} \langle v, F(z)w \rangle < \infty$$

para cada $v, w \in \mathcal{H}$. El principio de acotación uniforme implica que

$$\sup_{z \in \gamma} \|F(z)\| < \infty.$$

Por lo tanto, $q(\cdot, \cdot)$ está acotado como un formulario sesquilineal, con

$$\|q(\cdot, \cdot)\| \leq \ell(\gamma) \sup_{z \in \gamma} \|F(z)\|.$$

Por el Corolario del Lema de Riesz, se sigue que existe un único $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ tal que

$$q(v, w) = \langle v, Tw \rangle,$$

con $\|T\| = \|q(\cdot, \cdot)\|$.

Uno podría extender la definición de q a través de una formulación con valor de operador de sumas de Riemann. Este enfoque permite suposiciones de regularidad considerablemente menos restrictivas sobre F y γ . No entraremos en detalles aquí, ya que la formulación débil dada en el Lema ?? es suficiente para nuestras aplicaciones. ■

Decimos que una función $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es débilmente holomorfa si, para cada $v, w \in \mathcal{H}$, la función

$$z \mapsto \langle v, F(z)w \rangle$$

es holomorfa en Ω . La ventaja de usar nociones débiles de holomorfia e integración de contorno es que podemos desarrollar la teoría utilizando el análisis complejo ordinario. El siguiente resultado muestra que no perdemos nada al tomar este enfoque.

Teorema 4.4.1. Equivalencia de Holomorfia y Analiticidad

Para una función $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$, estas condiciones son equivalentes:

- (a) F es analítica.
- (b) F es holomorfa.
- (c) F es débilmente holomorfa.

Para probar que (a) implica (b), uno debe demostrar que la diferenciación término a término de la serie de potencias está justificada. Este argumento es esencialmente el mismo que en el caso escalar, por lo que omitimos los detalles.

El hecho de que (b) implica (c) es trivial, por lo que queda demostrar que (c) implica (a). Suponga que F es débilmente holomorfa en Ω . Sea $z_0 \in \Omega$. Elija $r > 0$ de tal manera que $\overline{B}(z_0; r) \subset \Omega$, y sea $\gamma := \partial B(z_0; r)$. Aplicando la fórmula de Cauchy a la función holomorfa escalar $\langle v, F(\cdot)w \rangle$ da una expansión

$$\langle v, F(z)w \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n a_n(v, w),$$

donde

$$a_n(v, w) := \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\langle v, F(z)w \rangle}{(z - z_0)^{n+1}} dz$$

para $n \in \mathbb{Z}_0$.

Por el Lema ??, el coeficiente puede escribirse como

$$a_n(v, w) = \langle v, A_n w \rangle,$$

donde

$$A_n := \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{F(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz.$$

4. Espectro y Resolvente

El Lema ?? también proporciona la estimación,

$$\|A_n\| \leq \frac{1}{r^n} \sup_{z \in \gamma} \|F(z)\|,$$

lo que implica que la serie de potencias

$$Q(z) := \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n A_n$$

converge absolutamente para $|z - z_0| < r$. Por lo tanto,

$$\langle v, F(z)w \rangle = \langle v, Q(z)w \rangle$$

para todos $v, w \in \mathcal{H}$. Por lo tanto, $F(z) = Q(z)$ para $|z - z_0| < r$, y así $F(z)$ es analítica en z_0 .

Como corolario de la prueba del Teorema, obtenemos una forma de operador del estimado de derivada de Cauchy.

Teorema 4.4.2. Estimado de Derivada de Cauchy para Operadores

Suponga que $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es analítica, y $\overline{B(z_0; r)} \subset \Omega$. Entonces las derivadas de F en z_0 satisfacen

$$\|F^{(n)}(z_0)\| \leq \frac{M_r n!}{r^n}$$

para $n \in \mathbb{N}$, donde

$$M_r := \sup_{|z - z_0| = r} \|F(z)\|.$$



Demostración. Para demostrar este teorema, utilizaremos la fórmula integral de Cauchy para derivadas en el contexto de operadores. Sea $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ una función analítica y consideremos un punto z_0 en Ω . Elijamos $r > 0$ de tal manera que la bola cerrada $\overline{B(z_0; r)}$ esté contenida en Ω .

Para cada $n \in \mathbb{N}$, la n -ésima derivada de F en z_0 se puede expresar mediante la fórmula de Cauchy para derivadas como

$$F^{(n)}(z_0) = \frac{n!}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{F(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz,$$

donde γ es la frontera de la bola $B(z_0; r)$, es decir, una circunferencia de radio r centrada en z_0 .

La norma de $F^{(n)}(z_0)$ se puede estimar utilizando la norma operatorial y la

fórmula integral de Cauchy como sigue:

$$\begin{aligned}
 \|F^{(n)}(z_0)\| &\leq \frac{n!}{2\pi} \left\| \int_{\gamma} \frac{F(z)}{(z-z_0)^{n+1}} dz \right\| \\
 &\leq \frac{n!}{2\pi} \int_{\gamma} \frac{\|F(z)\|}{|z-z_0|^{n+1}} |dz| \\
 &\leq \frac{n!}{2\pi} \int_{\gamma} \frac{M_r}{r^{n+1}} |dz| \\
 &= \frac{n!M_r}{r^{n+1}} \frac{1}{2\pi} \int_{\gamma} |dz| \\
 &= \frac{n!M_r}{r^{n+1}} \cdot 2\pi r \\
 &= \frac{M_r n!}{r^n},
 \end{aligned}$$

donde $M_r = \sup_{|z-z_0|=r} \|F(z)\|$. Esto concluye la demostración. ■

Estos teoremas establecen una relación profunda entre la analiticidad, la holomorfía y los operadores en el contexto de las funciones de operadores con valor. La interpretación de estas propiedades en el análisis funcional proporciona una poderosa herramienta para tratar con familias de operadores y entender su comportamiento en términos de propiedades analíticas y holomorfas.

Analicidad del Resolvente

Podemos aplicar ahora la teoría introducida en la Sección ?? al resolvente y utilizarla para derivar propiedades básicas del espectro.

Teorema 4.4.3. Resolvente y su Analiticidad

Para un operador cerrado T , el conjunto resolvente $\rho(T)$ es abierto y la función $z \mapsto (T - z)^{-1}$ es analítica en cada componente conexa de $\rho(T)$. ♥

Demostración. Para comodidad en esta discusión, escribamos el resolvente como $R(z; T) := (T - z)^{-1}$.

Para ver que $T - z$ es invertible para z suficientemente cercano a un punto arbitrario $z_0 \in \rho(T)$, primero notamos que

$$(T - z)R(z_0; T) = I - (z - z_0)R(z_0; T).$$

El lado derecho puede ser invertido usando la serie de Neumann,

$$Q(z) := \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n R(z_0; T)^n,$$

que define una función analítica para $|z - z_0| < \|R(z_0; T)\|^{-1}$. Se sigue de esta relación que

$$(T - z)Q(z)R(z_0; T) = I.$$

Similarmente, en el dominio $\mathcal{D}(T)$ tenemos

$$R(z_0; T)(T - z) = I - (z - z_0)R(z_0; T),$$

4. Espectro y Resolvente

Aplicando $Q(z)$ a esta relación da

$$Q(z)R(z_0; T)(T - z) = I$$

en $\mathcal{D}(T)$. Juntas, estas relaciones implican que

$$R(z; T) = Q(z)R(z_0; T).$$

Por la definición de $Q(z)$, esto nos da una expansión

$$R(z; T) = \sum_{n=0}^{\infty} (z - z_0)^n R(z_0; T)^{n+1}$$

para $|z - z_0| < \|R(z_0; T)\|^{-1}$. Así $R(\cdot; T)$ es analítica en z_0 . ■

El Teorema ?? tiene varios corolarios importantes. El primero es una simple observación de la relación entre la norma del resolvente y el radio de convergencia en la expansión.

Corolario 4.4.1. Norma del Resolvente y Distancia al Espectro

Para $z \in \rho(T)$,

$$\|(T - z)^{-1}\| \geq \frac{1}{\text{dist}(z, \sigma(T))}.$$



Corolario 4.4.2. Primera Identidad del Resolvente

Para un operador $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow \mathcal{H}$, los resolventes en puntos $z, w \in \rho(T)$ conmutan y satisfacen

$$(T - z)^{-1} - (T - w)^{-1} = (z - w)(T - z)^{-1}(T - w)^{-1}.$$



Corolario 4.4.3. Segunda Identidad del Resolvente

Si $\mathcal{D}(S) = \mathcal{D}(T)$ y $z \in \rho(S) \cap \rho(T)$, entonces

$$(S - z)^{-1} - (T - z)^{-1} = (S - z)^{-1}(S - T)(T - z)^{-1}.$$



Radio Espectral

Definición 4.4.2. Radio Espectral

El radio espectral de un operador T se define como

$$r(T) := \sup_{z \in \sigma(T)} |z|.$$



Para una matriz autoadjunta, el radio espectral es igual a la norma. Esperaríamos que estas cantidades estén estrechamente relacionadas también para operadores.

El radio espectral de un operador acotado puede estimarse utilizando el análogo de una expansión en serie de Laurent para el resolvente. Para $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, reemplazando z por $1/z$ en la fórmula de la serie de Neumann da

$$(T - z)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} z^{-n-1} T^n,$$

para $|z| > \|T\|$.

Corolario 4.4.4. Espectro y Radio Espectral

Para un operador acotado T , el espectro no está vacío y el radio espectral satisface

$$r(T) \leq \|T\|.$$



Demostración. El límite en el radio espectral sigue inmediatamente de la expansión. Para probar la primera afirmación, suponemos que $\sigma(T)$ está vacío. Esto implica que $(T - z)^{-1}$ es analítico para todo $z \in \mathbb{C}$ por el Teorema ???. Para $v, w \in \mathcal{H}$, la función

$$h(z) := \langle (T - z)^{-1} v, w \rangle,$$

es entonces entera y satisface $h(z) \rightarrow 0$ cuando $z \rightarrow \infty$. Por lo tanto $h \equiv 0$ por el teorema de Liouville. Dado que esto se cumple para cualquier v, w , implica que $(T - z)^{-1} = 0$ para todo z , lo cual no es posible. ■

La relación entre la norma de un operador acotado y su radio espectral fue precisada por I. M. Gelfand.

Teorema 4.4.4. Fórmula del Radio Espectral de Gelfand

Para un operador acotado T ,

$$r(T) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|T^n\|^{\frac{1}{n}}.$$

Además, si T es acotado y autoadjunto entonces $r(T) = \|T\|$.



Demostración. Si $T^n - z^n$ es invertible para $z \in \mathbb{C}$ y $n \in \mathbb{N}$, entonces $T - z$ también lo es, por

$$(T - z)^{-1} = (T^n - z^n)^{-1} (T^{n-1} + zT^{n-2} + \dots + z^{n-1}).$$

Por lo tanto, si $\lambda \in \sigma(T)$, entonces $\lambda^n \in \sigma(T^n)$, y tenemos

$$|\lambda|^n \leq \|T^n\|.$$

Tomando la raíz n -ésima y dejando que $n \rightarrow \infty$ muestra que

$$r(T) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|T^n\|^{\frac{1}{n}}.$$

Por otro lado, considerando la función $F(z) := (I - zT)^{-1}$, esta es analítica cerca de $z = 0$ por la expansión de la serie de Neumann, y para $0 < |z| < r(T)^{-1}$ por la identidad

$$F(z) = -z(T - 1/z)^{-1}.$$

4. Espectro y Resolvente

Aplicando el Teorema ?? al disco $\{|z| \leq a\}$ para $a < r(T)^{-1}$ da la estimación

$$\|T^n\| \leq M_\varepsilon a^{-n}$$

para $n \in \mathbb{N}$. Al límite cuando $n \rightarrow \infty$ esto da

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|T^n\|^{\frac{1}{n}} \leq a^{-1},$$

para todo $a < r(T)^{-1}$. Por lo tanto,

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \|T^n\|^{\frac{1}{n}} \leq r(T).$$

En combinación con la relación anterior esto prueba que $\|T^n\|^{\frac{1}{n}} \rightarrow r(T)$ cuando $n \rightarrow \infty$. Si $A \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es autoadjunto, entonces $\|A^2\| = \|A\|^2$ por (3.4). Iterando este resultado, vemos que

$$\|A^{2^k}\| = \|A\|^{2^k}$$

para $k \in \mathbb{N}$. Restringiendo el límite en la fórmula del radio espectral a la subsecuencia $n = 2^k$ da $r(A) = \|A\|$.

Para operadores no acotados en general, no hay un análogo de Corolario ?? o Teorema ?. El espectro de un operador no acotado puede estar vacío, por ejemplo. Sin embargo, para un operador autoadjunto A veremos en el Capítulo 5 que $\sigma(A)$ no está vacío y que $r(A) = \infty$ si y solo si A es no acotado (ver Teorema 5.9). ■

4.5. Espectro de Operadores Autoadjuntos

Algunas propiedades básicas del espectro de una matriz autoadjunta se transfieren directamente al caso de operadores.

Teorema 4.5.1. Espectro de Operador Autoadjunto

El espectro de un operador autoadjunto es real, y los eigenvectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales.



Demostración. Si A es cerrado, entonces $A - z$ tiene inversa acotada si y solo si $A - z$ es biyectiva, por el Teorema ?. Así, para A autoadjunto y z estrictamente complejo, el Teorema ? implica que $z \in \rho(A)$. Por lo tanto, $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$.

Supongamos ahora que ϕ_1 y ϕ_2 son eigenvectores de A , con autovalores correspondientes λ_1, λ_2 . Dado que los autovalores son reales, tenemos

$$\begin{aligned} 0 &= \langle A\phi_1, \phi_2 \rangle - \langle \phi_1, A\phi_2 \rangle \\ &= (\lambda_1 - \lambda_2)\langle \phi_1, \phi_2 \rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto, $\lambda_1 \neq \lambda_2$ implica que ϕ_1 es ortogonal a ϕ_2 . ■

Otra característica importante de los operadores autoadjuntos es el hecho de que cada punto en el espectro es un .autovalor aproximado.en el siguiente sentido.

Teorema 4.5.2. Autovalor Aproximado

Sea A un operador autoadjunto. Entonces $z \in \sigma(A)$ si y solo si existe una secuencia $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ con $\|u_n\| = 1$ y

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - z)u_n\| = 0.$$



Demostración. Si $z \in \rho(A)$, entonces $(A - z)^{-1}$ mapea \mathcal{H} en $\mathcal{D}(A)$. Para $u \in \mathcal{D}(A)$, podemos establecer $u = (A - z)^{-1}v$ para algún $v \in \mathcal{H}$. Si $\|u\| = 1$, entonces la acotación de $(A - z)^{-1}$ da

$$1 \leq \|(A - z)^{-1}\| \|v\|.$$

Por lo tanto,

$$\|(A - z)u\| \geq \frac{1}{\|(A - z)^{-1}\|}$$

para todos los vectores unitarios $u \in \mathcal{D}(T)$. Por lo tanto, no puede existir una secuencia de vectores unitarios para los cuales $(A - z)u_n \rightarrow 0$.

Ahora asumamos $\lambda \in \sigma(A)$. Si λ es un autovalor, entonces podemos trivialmente establecer cada u_n igual a un eigenvector. Así que supongamos que λ no es un autovalor, lo que significa que $A - \lambda$ es inyectivo pero no sobreyectivo. En este caso, por el Lema ?? y el hecho de que A es autoadjunto, tenemos que

$$\text{rango}(A - \lambda)^\perp = \{0\}.$$

Por lo tanto, el rango de $(A - \lambda)$ es denso en \mathcal{H} . Como $A - \lambda$ es inyectivo, existe un mapa lineal $W : \text{rango}(A - \lambda) \rightarrow \mathcal{D}(A)$ tal que $(A - \lambda)W = I$ en el rango $(A - \lambda)$. Debido a que el rango $(A - \lambda)$ es denso, el operador W es no acotado. De lo contrario, W podría extenderse a \mathcal{H} por continuidad, lo que implicaría $\lambda \in \rho(A)$. Dado que W es no acotado, existe una secuencia $\{v_n\} \subset \text{rango}(A - \lambda)$ tal que $\|v_n\| = 1$ y

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|Wv_n\| = \infty.$$

De la secuencia $\{v_n\}$ construimos una secuencia de vectores unitarios,

$$u_n := \frac{Wv_n}{\|Wv_n\|},$$

satisfaciendo

$$\|(A - \lambda)u_n\| = \frac{1}{\|Wv_n\|}.$$

Entonces, por la relación anterior,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n\| = 0.$$



Resultados como el Teorema ?? son particularmente útiles para perturbaciones de un operador cuyo espectro ya se conoce. Esta situación es común en aplicaciones físicas.

4. Espectro y Resolvente

Ejemplo 4.5.1. Operador de Schrödinger en Mecánica Cuántica

En mecánica cuántica, un operador de Schrödinger en \mathbb{R}^n es un operador diferencial de la forma $-\Delta + V$ donde V es una función potencial que actúa mediante multiplicación. Supongamos que V es una función acotada, real y con soporte compacto. Entonces la multiplicación por V define un operador acotado, y por lo tanto $-\Delta + V$ es autoadjunto en el mismo dominio que $-\Delta$, es decir, $H^2(\mathbb{R}^n)$.

Podemos construir secuencias aproximativas para $\sigma(-\Delta + V)$ a partir de funciones de ondas planas $e^{i\xi \cdot x}$, para $\xi \in \mathbb{R}^n$, que satisfacen

$$-\Delta e^{i\xi \cdot x} = |\xi|^2 e^{i\xi \cdot x}.$$

Continuando con el operador de Schrödinger en \mathbb{R}^n , definimos la familia de cortes $\chi_k \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ mediante

$$\chi_k(x) := \psi(|x| - k),$$

para $k \in \mathbb{N}$. Aquí, ψ es una función en $C^\infty(\mathbb{R})$ con $\psi(t) = 1$ para $t \leq 0$ y $\psi(t) = 0$ para $t \geq 1$. Estos cortes se utilizan para construir una secuencia

$$f_k(x) := \chi_k(x) e^{i\xi \cdot x},$$

que se aproximará al espectro de $-\Delta + V$.

Para esta secuencia, encontramos que

$$(-\Delta + V - |\xi|^2) f_k = V f_k - [\Delta, \chi_k] e^{i\xi \cdot x},$$

donde el conmutador

$$[\Delta, \chi_k] := \Delta \chi_k - \chi_k \Delta,$$

es un operador diferencial de primer orden. Para k grande, $|V f_k| = |V|$, y podemos estimar

$$\begin{aligned} \|[\Delta, \chi_k] e^{i\xi \cdot x}\|^2 &\leq C_\xi \text{vol}\{k \leq |x| \leq k+1\} \\ &= O(k^{n-1}). \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\|(-\Delta + V - |\xi|^2) f_k\| = O(k^{(n-1)/2}).$$

Dado que $\|f_k\|^2 \geq \text{vol} B(0; k)$, también tenemos

$$\|f_k\| \geq c k^{n/2}.$$

Así, $f_k / \|f_k\|$ define una secuencia de autovalores aproximados para $-\Delta + V$, con autovalor $|\xi|^2$. Por el Teorema ??, esto implica que

$$[0, \infty) \subset \sigma(-\Delta + V).$$

◇

Este ejemplo ilustra cómo el análisis de operadores autoadjuntos y sus

propiedades espectrales es fundamental en el contexto de la mecánica cuántica y otras áreas de la física.

4.6. Teoría Espectral de Operadores Compactos

En resultados previos, vimos que los operadores compactos son límites en la norma de operadores de rango finito. Por lo tanto, es de esperar que la teoría espectral de los operadores compactos guarde semejanza con la teoría matricial. En esta sección, establecemos varias propiedades espectrales para operadores compactos que son claros análogos de los resultados en álgebra lineal.

El primer paso es demostrar que los espacios propios de un operador compacto son de dimensión finita.

Lema 4.6.1. Dimensión Finita de Espacios Propios de Operadores Compactos

Si $T \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es compacto y $\lambda \neq 0$, entonces

$$\dim \ker(T - \lambda) < \infty.$$



Demostración. Suponga que $\ker(T - \lambda)$ es de dimensión infinita. Entonces, existe una secuencia ortogonal $\{e_j\}_{j=1}^{\infty}$ tal que $Te_j = \lambda e_j$. Si $\lambda \neq 0$, la secuencia $\{\lambda e_j\}$ claramente no tiene ninguna subsucesión convergente, por lo que T no es compacto. ■

Para analizar la resolvente $(T - z)^{-1}$ para $z \neq 0$, es equivalente estudiar la invertibilidad de $I - zT$ para $z \in \mathbb{C}$. Esto es la aplicación inmediata que tenemos en mente para el siguiente resultado. Sin embargo, la formulación más general, en términos de familias analíticas de operadores compactos, resulta ser bastante útil.

Teorema 4.6.1. Teorema Analítico de Fredholm

Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert separable y $F : \Omega \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ una función analítica en un dominio abierto y conectado $\Omega \subset \mathbb{C}$, tal que $F(z)$ es compacto para cada $z \in \Omega$. Entonces, o bien:

- (a) $I - F(z)$ no es invertible para todo $z \in \Omega$; o
- (b) existe un subconjunto discreto $\Gamma \subset \Omega$ tal que $I - F(z)$ es invertible para $z \in \Omega \setminus \Gamma$ y $\ker[I - F(z)] \neq \{0\}$ para $z \in \Gamma$.



Demostración. Sea z_0 un punto en Ω . Nuestro primer objetivo es reducir la invertibilidad de $I - F(z)$ a un problema de dimensión finita cerca de z_0 . Por la continuidad de $F(\cdot)$ existe un $\varepsilon > 0$ tal que

$$\|F(z) - F(z_0)\| < \frac{1}{2}$$

para $|z - z_0| < \varepsilon$. Por el Teorema 3.37, existe un operador de rango finito R tal que

$$\|F(z_0) - R\| < \frac{1}{2}.$$

4. Espectro y Resolvente

Entonces, por la desigualdad triangular,

$$\|F(z) - R\| < 1$$

para $z \in B(z_0; \varepsilon)$.

El operador

$$Q(z) := I - F(z) + R$$

es entonces invertible por series de Neumann para $z \in B(z_0; \varepsilon)$. Además, el hecho de que $F(z)$ es analítico implica que $Q(z)^{-1}$ es analítico. Esto se puede ver derivando los coeficientes de la serie de potencias para $Q(z)^{-1}$ a partir de los de $Q(z)$, justo como en el caso escalar.

La invertibilidad de $Q(z)$ se puede aprovechar para escribir

$$\begin{aligned} I - F(z) &= Q(z) - R \\ &= (I - RQ(z)^{-1})Q(z). \end{aligned}$$

Por lo tanto, $I - F(z)$ es invertible si y solo si $I - RQ(z)^{-1}$ es invertible. Además, $Q(z)$ mapea $\ker[I - F(z)]$ biyectivamente en $\ker[I - RQ(z)^{-1}]$.

Sea $\{e_1, \dots, e_n\}$ una base ortonormal para el rango de R , de modo que

$$Rv = \sum_{j=1}^n \langle e_j, Rv \rangle e_j.$$

Defina la función analítica matricial $M(z)$ por

$$[M(z)]_{ij} := \langle e_i, RQ(z)^{-1}e_j \rangle.$$

El determinante

$$D(z) := \det(I - M(z))$$

es analítico para $z \in B(z_0; \varepsilon)$. Por lo tanto, o bien $D \equiv 0$ o D tiene un conjunto discreto de ceros en este disco.

El siguiente paso es mostrar que $D(z) = 0$ precisamente cuando $I - F(z)$ no es invertible. Si $D(z) = 0$, entonces existe un vector no nulo $(a_1, \dots, a_n) \in \mathbb{C}^n$ tal que

$$a_i = \sum_{j=1}^n \langle e_i, RQ(z)^{-1}e_j \rangle a_j.$$

Para $v := \sum_{j=1}^n a_j e_j$ esto es equivalente a

$$v = RQ(z)^{-1}v.$$

Por (4.31),

$$(I - F(z))Q(z)v = 0.$$

Por lo tanto, $D(z) = 0$ implica $\ker[I - F(z)] \neq \{0\}$. Por otro lado, si $D(z) \neq 0$, entonces (4.32) no tiene soluciones no triviales. Por lo tanto, $I - RQ(z)^{-1}$ es invertible y también lo es $I - F(z)$.

Hasta este punto, hemos demostrado que el resultado reclamado se cumple en un vecindario de cada punto $z_0 \in \Omega$. La demostración se completa con un argumento estándar de conectividad. Los conjuntos

$$A := \{z \in \Omega : I - F(\cdot) \text{ no es invertible en un vecindario de } z\}$$

4.7. Teorema Espectral para Operadores Compactos Autoadjuntos

y

$B := \{z \in \Omega : I - F(\cdot) \text{ es invertible en un vecindario de } z \text{ menos un conjunto discreto}\}$

son abiertos y disjuntos por definición, y hemos mostrado que $\Omega = A \cup B$. Dado que Ω es conectado, esto implica que o bien $\Omega = A$ o bien $\Omega = B$. ■

Como corolario del teorema analítico de Fredholm, obtenemos la siguiente caracterización del espectro de un operador compacto.

Teorema 4.6.2. Teorema de Riesz-Schauder

Para un operador compacto T en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} , todos los elementos de $\sigma(T) \setminus \{0\}$ son autovalores de multiplicidad finita, y $\sigma(T)$ no tiene puntos de acumulación aparte de posiblemente 0.

Demostración. Se sigue directamente de aplicar el Teorema ?? con $F(z) = zT$, mostrando que existen puntos discretos en \mathbb{C} donde $I - zT$ no es invertible y que estos puntos son precisamente los recíprocos de los puntos en $\sigma(T) \setminus \{0\}$, cada uno de los cuales es un autovalor. La finitud de las multiplicidades de estos autovalores se garantiza por el Lema ??.

4.7. Teorema Espectral para Operadores Compactos Autoadjuntos

El Teorema ?? no garantiza la existencia de autovalores. Aunque sabemos que el espectro de un operador compacto no está vacío, por el Corolario ??, es posible que el espectro sea igual a $\{0\}$ y que cero no sea un autovalor. Por ejemplo, dado una base ortonormal $\{e_k\}$, considere el operador de desplazamiento modificado

$$Te_k = \frac{1}{k}e_{k+1}.$$

Si el operador compacto es autoadjunto, sin embargo, su teoría espectral se parece mucho al caso matricial.

Teorema 4.7.1. Teorema de Hilbert-Schmidt

Sea A un operador autoadjunto compacto en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} . Existe una base ortonormal $\{\phi_k\}$ para \mathcal{H} , tal que

$$A\phi_k = \lambda_k\phi_k$$

para $\lambda_k \in \mathbb{R}$, con $\lambda_k \rightarrow 0$ cuando $k \rightarrow \infty$.

Demostración. Para cada autovalor de A , elija una base ortonormal para el eigenspace correspondiente. Por el Teorema de operadores autoadjuntos y la separabilidad de \mathcal{H} , la colección de estos elementos de base forma una secuencia ortonormal $\{\phi_k\}$ (posiblemente finita). Si hay infinitamente muchos eigenvectores, entonces el hecho de que los autovalores convergen a cero sigue del Teorema de espectro de operadores compactos.

Sea \mathcal{W} el cierre del espacio generado por $\{\phi_n\}$. Es fácil verificar que ya que A preserva \mathcal{W} y es autoadjunto, también preserva \mathcal{W}^\perp . La restricción de A a

4. Espectro y Resolvente

\mathcal{W}^\perp define un nuevo operador A_\perp , que también es compacto y autoadjunto. Además, A_\perp no tiene eigenvectores, porque los eigenvectores de A estaban todos incluidos en \mathcal{W} . Por el Teorema de espectro de operadores compactos concluimos que A_\perp tiene radio espectral $r(A_\perp) = 0$, y sigue del Teorema de fórmula de radio espectral de Gelfand que $A_\perp = 0$. Esto implica también que $\mathcal{W}^\perp = \{0\}$, porque cualquier elemento no nulo de \mathcal{W}^\perp sería un eigenvector de A con autovalor 0. Por lo tanto, $\mathcal{W} = \mathcal{H}$, lo que implica que $\{\phi_n\}$ es una base. ■

El Teorema ?? es un caso especial del teorema espectral más general que se demostrará en el Capítulo 5. Para computaciones o estimaciones de los autovalores de un operador compacto, podemos adaptar otro principio básico del caso matricial. (Vea la Sección 5.4.3 para una versión más general de operadores.)

Teorema 4.7.2. Principio Max-Min para Operadores Compactos

Suponga que A es un operador compacto autoadjunto en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} . Si los autovalores positivos de A se listan en orden decreciente como $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots$, entonces

$$\lambda_k = \max_{W \in \Lambda_k} \left\{ \min_{u \in W \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \right\},$$

donde Λ_k denota el conjunto de subespacios de \mathcal{H} de dimensión k . 

Demostración. Sea $\{\phi_k\}$ los vectores base ortonormales correspondientes a los autovalores $\{\lambda_k\}$. Para $u \in \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_k\}$, la expansión en base implica que

$$\begin{aligned} \langle u, Au \rangle &= \sum_{j=1}^k \lambda_j |\langle u, \phi_j \rangle|^2 \\ &\geq \lambda_k \|u\|^2, \end{aligned}$$

(porque los autovalores están en orden decreciente). Por lo tanto,

$$\min_{u \in \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_k\} \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \geq \lambda_k.$$

Por otro lado, para cualquier $W \in \Lambda_k$, $W \cap \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_{k-1}\}^\perp$ tiene dimensión al menos 1. Por lo tanto, podemos elegir un vector no nulo $w \in W \cap \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_{k-1}\}^\perp$. El hecho de que w está en el complemento ortogonal de $\text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_{k-1}\}$ implica que w es una combinación de eigenvectores con eigenvalues menores o iguales a λ_k . Por tanto, se cumple que

$$\langle w, Aw \rangle \leq \lambda_k \|w\|^2,$$

lo que implica que

$$\min_{u \in W \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \leq \lambda_k.$$

■

4.8. Operadores de Hilbert-Schmidt

Supongamos que A es un operador autoadjunto compacto en $L^2(\Omega)$, donde Ω es un subconjunto abierto de \mathbb{R}^n . En secciones anteriores, introdujimos el concepto de operador de Hilbert-Schmidt, que puede representarse con un núcleo integral en L^2 . En términos de los autovalores y eigenvectores proporcionados por el teorema previo, este núcleo tiene la forma

$$K(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k(y)},$$

que converge en $L^2(\Omega \times \Omega)$. Para ciertas aplicaciones, es útil poder fortalecer la convergencia de K a convergencia uniforme imponiendo suposiciones adicionales sobre A y K .

Teorema 4.8.1. Teorema de Mercer

Supongamos que $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ es un dominio acotado y A es un operador de Hilbert-Schmidt positivo en $L^2(\Omega)$. Si el núcleo integral $K(\cdot, \cdot)$ es continuo en $\Omega \times \Omega$, entonces la eigenfunción ϕ_k es continua en Ω si $\lambda_k > 0$, y la expansión converge uniformemente en conjuntos compactos. 

Demostración. Basta asumir que $\lambda_k > 0$ para todo k , ya que términos con $\lambda_k = 0$ no afectan la suma. Por la definición de K y la ecuación de autovalores,

$$\phi_k(x) = \frac{1}{\lambda_k} \int_{\Omega} K(x, y) \phi_k(y) dy.$$

Dado que Ω es acotado, la eigenfunción ϕ_k también está en $L^1(\Omega)$, por el teorema de Fubini. La continuidad de ϕ_k se sigue de la ecuación anterior por el teorema de convergencia dominada.

Afirmamos que la positividad de A implica que $K(x, x) \geq 0$ para todo $x \in \Omega$. Notemos que si $K(x_0, x_0) < 0$ para algún $x_0 \in \Omega$, por continuidad $K(\cdot, \cdot) < 0$ en $U \times U$ para algún vecindario U de x_0 . Esto implicaría

$$\langle \chi_U, A\chi_U \rangle < 0,$$

contradiciendo la positividad de A .

Para $N \in \mathbb{N}$, definamos la suma parcial

$$K_N(x, y) := \sum_{k=1}^N \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k(y)},$$

con el resto $R_N(x, y) = K(x, y) - K_N(x, y)$. Tanto K_N como R_N son continuos. De la expansión en L^2 ,

$$R_N(x, y) := \sum_{k=N+1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k(y)},$$

vemos que $R_N(x, y)$ es el núcleo de un operador positivo. Por tanto, $R_N(x, x) \geq 0$, por el mismo razonamiento aplicado a K . Concluimos que $K_N(x, x) \leq K(x, x)$

4. Espectro y Resolvente

para todo N , lo que implica

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k |\phi_k(x)|^2 \leq K(x, x).$$

El teorema de Dini de análisis real dice que si una secuencia monótona de funciones continuas en un conjunto compacto converge puntualmente a una función continua, entonces la convergencia es uniforme. Por tanto, la cota implica que $\sum \lambda_k |\phi_k(x)|^2$ converge uniformemente en conjuntos compactos.

Para extender este resultado fuera de la diagonal, la desigualdad de Cauchy-Schwarz nos da

$$\left| \sum_{k=m_1}^{m_2} \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k(y)} \right|^2 \leq \sum_{k=m_1}^{m_2} \lambda_k |\phi_k(x)|^2 \sum_{k=m_1}^{m_2} \lambda_k |\phi_k(y)|^2.$$

Por tanto, la serie

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \phi_k(x) \overline{\phi_k(y)}$$

converge uniformemente en conjuntos compactos. El límite es continuo y, por tanto, igual a K porque la ecuación se cumple en el sentido L^2 . ■

4.9. Traza de Operadores

Supongamos que A es un operador compacto autoadjunto en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} . Por el Teorema de operadores compactos autoadjuntos, existe una base ortonormal $\{\phi_k\}$ consistente en eigenvectores tales que los correspondientes autovalores $\{\lambda_k\}$ son discretos y convergen a cero. Se dice que el operador A es de clase traza si

$$\sum_k |\lambda_k| < \infty,$$

en cuyo caso definimos

$$\text{tr } A := \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k.$$

Un operador compacto T es de Hilbert-Schmidt si y solo si T^*T es de clase traza, y la norma abstracta de Hilbert-Schmidt introducida en secciones previas puede calcularse como

$$\|T\|_{\text{HS}}^2 = \text{tr } T^*T.$$

En muchas aplicaciones de la teoría espectral, el operador compacto se presenta en forma de un núcleo integral, y es particularmente útil poder expresar la traza como una integral sobre este núcleo.

Teorema 4.9.1. Teorema de la Traza para Operadores de Hilbert-Schmidt

Supongamos que $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ es un dominio acotado. Si A es un operador de

Hilbert-Schmidt positivo en $L^2(\Omega)$, con núcleo continuo $K(\cdot, \cdot)$, entonces

$$\operatorname{tr} A = \int_{\Omega} K(x, x) dx,$$

donde A es de clase traza si y solo si la integral es finita.



Demostración. Los autovalores λ_k y las eigenfunciones ϕ_k de A cumplen con $\lambda_k \geq 0$. El teorema de convergencia monótona nos permite afirmar que

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \int_{\Omega} \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k |\phi_k(x)|^2 dx.$$

Si K es continuo, entonces, de acuerdo con el Teorema de Mercer, se sigue que

$$\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k = \int_{\Omega} K(x, x) dx.$$



CAPÍTULO 5

El Teorema Espectral

El primer teorema espectral para matrices fue probado por Augustin-Louis Cauchy, quien estableció que una matriz simétrica real es diagonalizable en 1826. Charles Hermite extendió este resultado en 1855, probando que una matriz autoadjunta compleja de $n \times n$ tiene n autovalores reales, y existe una base ortonormal para \mathbb{C}^n consistente en eigenvectores. El teorema de Hilbert-Schmidt (ver Teorema de Hilbert-Schmidt) muestra que los operadores compactos autoadjuntos son diagonalizables en el mismo sentido.

En la teoría de operadores, el papel de las matrices diagonales es desempeñado por operadores de multiplicación del tipo discutido en el Ejemplo 3.2. La versión operador del teorema espectral establece que un operador autoadjunto es unitariamente equivalente a un operador de multiplicación. Esto fue establecido independientemente por Marshall Stone y John von Neumann a principios de la década de 1930. Su desarrollo del teorema espectral fue motivado por la mecánica cuántica, donde los operadores autoadjuntos juegan un papel central como las representaciones de observables físicos como la posición, el momento y la energía.

Ya hemos visto un caso especial del teorema espectral de operadores en el Ejemplo 3.23, donde se observó que la transformada de Fourier en \mathbb{R}^n conjugaba al Laplaciano a la multiplicación por $|\xi|^2$. Para ilustrar la diferencia entre la forma de operador de multiplicación del teorema espectral y la versión matricial, consideremos el caso de un operador diagonal.

Ejemplo 5.0.1. Operador Diagonal

Supongamos que A es un operador autoadjunto en \mathcal{H} , con una base ortonormal de eigenvectores $\{\phi_n\}$ tal que $A\phi_n = \lambda_n\phi_n$ para $\lambda_n \in \mathbb{R}$. Supongamos además que los autovalores λ_n son distintos. Para expresar A como un operador de multiplicación, definimos la medida

$$\mu := \sum_n \delta_{\lambda_n},$$

donde δ_x denota la medida puntual en $x \in \mathbb{R}$. El mapa unitario $Q : L^2(\mathbb{R}, d\mu) \rightarrow \mathcal{H}$ definido por

$$Qf := \sum_n f(\lambda_n)\phi_n$$

5. El Teorema Espectral

conjuga A a un simple operador de multiplicación,

$$Q^{-1}AQ = M_x.$$

Nota: Si aplicamos la misma construcción a un autovalor λ con multiplicidad m , el término correspondiente en (5.1) sería $m\delta_\lambda$. Esto cambia la normalización de la medida, requiriendo algún ajuste en (5.2) para hacer que Q sea unitario, pero no afecta la multiplicidad de λ como autovalor de M_x . Para acomodar multiplicidades más altas en esta construcción, necesitaríamos tomar múltiples copias de \mathbb{R} . ◇

El teorema espectral puede extenderse desde el caso autoadjunto a la clase de operadores normales, es decir, operadores acotados que conmutan con sus adjuntos. De hecho, la extensión a operadores normales podría derivarse como un caso especial de un teorema espectral conjunto para familias conmutativas de operadores acotados. Limitaremos nuestra atención al caso autoadjunto no acotado en este capítulo, porque ese es el contexto relevante para todas las aplicaciones discutidas más adelante en el libro. Nuestro enfoque para la prueba implica explotar la conexión entre operadores autoadjuntos y unitarios, un truco debido a von Neumann.

5.1. Operadores Unitarios

En teoría de operadores, el término “cálculo funcional” se refiere a la capacidad de aplicar una función a un operador. La construcción del cálculo funcional continuo para operadores autoadjuntos acotados se desarrolló en los ejercicios previos, basándose en aproximaciones polinomiales.

En esta sección, derivaremos el cálculo funcional para operadores unitarios basándonos en series de Fourier y lo utilizaremos para probar un teorema espectral. Recordemos que un mapa $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es unitario si y solo si

$$U^*U = UU^* = I. \quad (5.1)$$

Esta fórmula sugiere que el espectro de un operador unitario debería ser un subconjunto del círculo unitario $\mathbb{S} := \{|z| = 1\} \subset \mathbb{C}$, lo cual es efectivamente el caso.

Cálculo Funcional Continuo

Nuestro primer objetivo es definir $f(U)$ para U unitario y f una función continua $\mathbb{S} \rightarrow \mathbb{C}$. Si f tiene una expansión convergente con respecto a la base de Fourier $\{e^{ik\theta}\}$, entonces podemos definir $f(U)$ reemplazando $e^{ik\theta}$ en la serie con U^k . Esto proporcionará el primer paso en nuestra construcción.

Para una función $f \in L^1(\mathbb{S})$, definimos los coeficientes de Fourier discretos como

$$\hat{f}(k) := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(e^{i\theta}) e^{-ik\theta} d\theta \quad (5.2)$$

para $k \in \mathbb{Z}$. Si $f \in C^\infty(\mathbb{S})$, entonces la integración por partes repetida proporciona la estimación

$$\hat{f}(k) = O((1 + |k|)^{-n}) \quad (5.3)$$

5.1. Operadores Unitarios

para todo $n \in \mathbb{N}$. En este caso, definimos $f(U)$ para $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ unitario por la serie convergente

$$f(U) := \sum_{k \in \mathbb{Z}} \hat{f}(k) U^k. \quad (5.4)$$

Para extender esta definición a funciones continuas, el hecho crucial a establecer es la positividad de $f(U)$ cuando $f \geq 0$. Esto nos permitirá controlar la convergencia $f_n(U) \rightarrow f(U)$ en la topología de operadores, asumiendo que la secuencia $\{f_n\} \subset C^\infty(\mathbb{S})$ converge uniformemente a f . Recordemos que un operador A es positivo ($A \geq 0$) si

$$\langle v, Av \rangle \geq 0, \quad (5.5)$$

para todo $v \in \mathcal{D}(A)$.

Teorema 5.1.1. Cálculo Funcional Continuo para Operadores Unitarios

Supongamos que $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es unitario. Entonces el mapa $f \mapsto f(U)$ definido por (5.4) se extiende de manera única a un mapa continuo $C(\mathbb{S}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ que satisface las siguientes propiedades:

- (a) $f(U)^* = \overline{f}(U)$.
- (b) $f(U)g(U) = (fg)(U)$.
- (c) Si $f \geq 0$, entonces $f(U) \geq 0$.
- (d) $\|f(U)\| \leq \sup |f|$.



Demostración. Comenzamos la demostración estableciendo las propiedades para funciones suaves, específicamente para $f \in C^\infty(\mathbb{S})$.

Para la propiedad (a), consideramos la estructura de $f(U)$ como está definida en (5.4). Tomando en cuenta que $U^* = U^{-1}$, el adjunto de $f(U)$ se expresa como:

$$f(U)^* = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \overline{\hat{f}(k)} U^{-k}.$$

Utilizando la definición de los coeficientes Fourier en (5.2), se deduce que $\overline{\hat{f}(k)} = \widehat{\overline{f}}(-k)$. Esta relación confirma que para funciones suaves, se cumple que $f(U)^* = \overline{f}(U)$, lo cual establece la propiedad (a).

Para la propiedad (b), consideramos dos funciones suaves $f, g \in C^\infty(\mathbb{S})$. Aplicando la fórmula de convolución para series de Fourier, obtenemos que:

$$\widehat{fg}(k) = \sum_{l \in \mathbb{Z}} \hat{f}(l) \hat{g}(k-l).$$

La interpretación de esta fórmula en el contexto de operadores nos lleva directamente a concluir que $f(U)g(U) = (fg)(U)$, lo que valida la propiedad (b).

Para la propiedad (c), asumimos que $f \in C^\infty(\mathbb{S})$ y que $f \geq 0$. Definimos $h_\varepsilon(z) := \sqrt{f(z) + \varepsilon}$ para un ε positivo arbitrario. Esta función es suave y, por ende, $h_\varepsilon(U)$ está bien definido por (5.4) y es autoadjunto por la propiedad (a)

5. El Teorema Espectral

ya probada. Además, la relación $h_\varepsilon(U)^2 = f(U) + \varepsilon$ se sigue de la definición. Para cualquier vector $v \in \mathcal{H}$, tenemos que:

$$\begin{aligned}\langle v, f(U)v \rangle &= \langle v, (h_\varepsilon(U)^2 - \varepsilon)v \rangle \\ &= \|h_\varepsilon(U)v\|^2 - \varepsilon\|v\|^2 \\ &\geq -\varepsilon\|v\|^2.\end{aligned}$$

Al tomar el límite cuando ε tiende a cero, obtenemos $\langle v, f(U)v \rangle \geq 0$, lo que demuestra que $f(U) \geq 0$ y así se establece la propiedad (c).

Para la propiedad (d), consideramos una función suave $f \in C^\infty(\mathbb{S})$ y definimos $M := \sup |f|$. La desigualdad $M^2 - |f|^2 \geq 0$ y la propiedad (c) implican que:

$$\langle v, (M^2 - |f|^2(U))v \rangle \geq 0.$$

Dado que $\langle v, |f|^2(U)v \rangle = \|f(U)v\|^2$ por las propiedades (a) y (b), concluimos que $\|f(U)v\| \leq M\|v\|$, lo cual valida la propiedad (d).

Después de establecer las propiedades para funciones suaves, extendemos los resultados a $C(\mathbb{S})$. El teorema de aproximación de Weierstrass nos asegura que $C^\infty(\mathbb{S})$ es denso en $C(\mathbb{S})$ con respecto a la norma sup. Por lo tanto, para cada $f \in C(\mathbb{S})$, existe una secuencia $\{f_n\} \subset C^\infty(\mathbb{S})$ tal que $f_n \rightarrow f$ uniformemente en \mathbb{S} . La correspondiente secuencia de operadores $\{f_n(U)\}$ forma una sucesión de Cauchy en $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ gracias a la propiedad (d) y, por ende, podemos definir $f(U)$ como el límite de $\{f_n(U)\}$.

Para concluir, verificamos que $f(U)$ es independiente de la elección específica de $\{f_n\}$ y que las propiedades (a)-(d) se preservan en el límite. Esto completa la demostración del teorema. ■

Medidas Espectrales

La conexión entre el cálculo funcional continuo y la forma del operador de multiplicación del teorema espectral es proporcionada por un resultado fundamental de la teoría de la medida. Utilizaremos el cálculo funcional para construir la medida, considerando funcionales $C(\mathbb{S}) \rightarrow \mathbb{C}$ de la forma

$$f \mapsto \langle v, f(U)v \rangle,$$

para $v \in \mathcal{H}$. Por la propiedad (c) del Teorema ??, este funcional es positivo en el sentido de que si $f \geq 0$, entonces

$$\langle v, f(U)v \rangle \geq 0.$$

Un funcional positivo en $C(\mathbb{S})$ conlleva una medida de Borel en \mathbb{S} , de acuerdo con el siguiente teorema, que es una versión adaptada del Teorema de Representación de Riesz para nuestro contexto.

Teorema 5.1.2. Teorema de Representación de Riesz Adaptado

Dado un funcional lineal positivo $\beta : C(\mathbb{S}) \rightarrow \mathbb{C}$, existe una única medida de Borel μ en \mathbb{S} tal que

$$\beta(f) = \int_{\mathbb{S}} f d\mu$$

para todo $f \in C(\mathbb{S})$.

Dada la naturaleza de nuestro funcional positivo β , definimos la medida de un subconjunto abierto $\Omega \subset \mathbb{S}$ por

$$\mu_0(\Omega) := \sup\{\beta(f) : f \in C(\mathbb{S}), 0 \leq f \leq 1, \text{supp } f \subset \Omega\}$$

y extendemos esta definición a conjuntos de Borel $A \subset \mathbb{S}$ mediante

$$\mu(A) := \inf\{\mu_0(\Omega) : A \subset \Omega \text{ con } \Omega \text{ abierto}\}.$$

Para un operador unitario $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ y un vector $v \in \mathcal{H}$, el Teorema ?? (c) implica que el funcional lineal es positivo en $C(\mathbb{S})$. Por el Teorema ??, existe una medida de Borel asociada μ_v en \mathbb{S} tal que

$$\langle v, f(U)v \rangle = \int_{\mathbb{S}} f d\mu_v.$$

Esta se denomina la medida espectral asociada con v .

Lema 5.1.1. Isometría Inducida por la Medida Espectral

Dado U y v como se describió anteriormente, el mapa $W_v : f \mapsto f(U)v$ tiene una única extensión continua a una isometría

$$W_v : L^2(\mathbb{S}, d\mu_v) \rightarrow \mathcal{H},$$

tal que

$$UW_v[f(z)] = W_v[zf(z)].$$

Demostración. Consideremos $f, g \in C(\mathbb{S})$. Por la definición de W_v y el Teorema ??,

$$\begin{aligned} \langle W_v f, W_v g \rangle &= \langle f(U)v, g(U)v \rangle \\ &= \langle v, f(U)^* g(U)v \rangle \\ &= \langle v, \bar{f}g(U)v \rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto, usando la medida espectral μ_v , tenemos que

$$\begin{aligned} \langle W_v f, W_v g \rangle &= \int_{\mathbb{S}} \bar{f}g d\mu_v \\ &= \langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{S}, d\mu_v)}. \end{aligned}$$

Dado que $C(\mathbb{S})$ es denso en $L^2(\mathbb{S}, d\mu_v)$, y W_v preserva el producto interno para funciones en $C(\mathbb{S})$, se deduce que W_v tiene una única extensión continua a una isometría de $L^2(\mathbb{S}, d\mu_v)$ a \mathcal{H} .

La identidad $UW_v[f(z)] = W_v[zf(z)]$ se sigue del hecho de que $(zf)(U) = Uf(U)$, como se estableció en el Teorema ??(b). ■

Teorema Espectral para Operadores Unitarios

La construcción de medidas espectrales nos lleva directamente a la demostración del teorema espectral en el caso unitario. Recordemos algunas características básicas de los operadores de multiplicación, que son fundamentales para nuestra discusión. Sea (X, \mathcal{M}, μ) un espacio de medida σ -finito. Para un operador de multiplicación M_f que actúa en $L^2(X, d\mu)$ con

$$\mathcal{D}(M_f) = \{u \in L^2(X, d\mu) : fu \in L^2(X, d\mu)\},$$

el adjunto se define por $M_f^* = M_{\bar{f}}$ sobre el mismo dominio $\mathcal{D}(M_f^*) = \mathcal{D}(M_f)$. Así, M_f es unitario si y solo si $|f| = 1$ casi en todas partes con respecto a μ .

Para $v \in \mathcal{H}$, está claro que el rango del mapa W_v del Lema ?? es el espacio

$$H_v := \overline{\text{span}\{U^k v, k \in \mathbb{Z}\}}.$$

Es posible que $H_v = \mathcal{H}$, caso en el cual la forma unitaria del teorema espectral ya está probada por el Lema ?. Si H_v no cubre todo \mathcal{H} , podemos iterar la construcción para obtener el siguiente resultado:

Teorema 5.1.3. Teorema Espectral para Operadores Unitarios

Supongamos que \mathcal{H} es un espacio de Hilbert separable y que $U \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ es unitario. Entonces existe un espacio de medida (Y, ν) , definido como

$$(Y, \nu) = \bigcup_k (\mathbb{S}, \nu_k),$$

donde $\{\nu_k\}$ es una secuencia de medidas finitas, y un mapa unitario

$$W : L^2(Y, d\nu) \rightarrow \mathcal{H},$$

tal que

$$W^{-1}UW = M_\eta,$$

donde $\eta(z) := z$ en cada copia de \mathbb{S} .

Demostración. Consideremos $\{w_j\}$ un conjunto denso y numerable de \mathcal{H} . Aplicando el Lema ?? al vector w_1 obtenemos una medida ν_1 y un isomorfismo

$$W_1 : L^2(\mathbb{S}, d\nu_1) \rightarrow H_1.$$

Si $H_1 = \mathcal{H}$, entonces la prueba está completa. De lo contrario, observamos que U preserva H_1 por definición y, por la unitariedad, U también preserva H_1^\perp .

Luego, seleccionamos el primer j tal que $w_j \notin H_1$, y dejamos que ν_2 sea la proyección ortogonal de este w_j en H_1^\perp . Aplicando el Lema ?? a ν_2 obtenemos una medida μ_2 y una isometría W_2 cuyo rango es H_2 . Luego, si $H_1 \oplus H_2 = \mathcal{H}$, la prueba está completa. De lo contrario, tomamos el primer $w_j \notin H_1 \oplus H_2$ y usamos esto para definir $\nu_3 \in (H_1 \oplus H_2)^\perp$ mediante proyección ortogonal.

Continuando este proceso, obtenemos una secuencia $\{\nu_k\}$ (posiblemente finita) tal que $w_j \in \bigoplus_k H_k$ para todo j . Esto implica que

$$\mathcal{H} = \bigoplus_k H_k.$$

Para el espacio de medida $(Y, \nu) := \bigcup_k (\mathbb{S}, \nu_k)$, hay una descomposición correspondiente

$$L^2(Y, \nu) = \bigoplus_k L^2(\mathbb{S}, \nu_k).$$

Así, tenemos un mapa unitario $W : L^2(Y, \nu) \rightarrow \mathcal{H}$ dado por $\bigoplus_k W_k$. La relación $W^{-1}UW = M_\eta$ se sigue del Lema ?? y la estructura de la descomposición. ■

Teorema Espectral para Operadores Autoadjuntos

El desarrollo de medidas espectrales nos conduce directamente a la formulación y demostración del teorema espectral en el caso de operadores autoadjuntos.

Teorema 5.1.4. Teorema Espectral - Forma de Operador de Multiplicación

Supongamos que A es un operador autoadjunto en un espacio de Hilbert separable \mathcal{H} . Existe una colección contable de medidas de Borel finitas $\{\mu_k\}$ sobre \mathbb{R} y un mapa unitario $Q : L^2(X, \mu) \rightarrow \mathcal{H}$, con $(X, \mu) = \bigcup_k (\mathbb{R}, \mu_k)$, tal que

$$Q^{-1}AQ = M_\alpha$$

y

$$\mathcal{D}(A) = Q\mathcal{D}(M_\alpha),$$

donde $\alpha : X \rightarrow \mathbb{R}$ está dado por $\alpha(x) := x$ en cada copia de \mathbb{R} . 

La equivalencia unitaria de A con M_α implica, por resultados previos, que

$$\sigma(A) = \text{rango esencial}(\alpha),$$

donde el rango esencial se define con respecto a μ . Esto significa que las medidas μ_k tienen soporte dentro de $\sigma(A)$. La asociación entre operadores autoadjuntos y unitarios se inspira en la transformación de Cayley, que mapea la línea real al círculo unitario $\mathbb{S} \subset \mathbb{C}$.

Lema 5.1.2. Transformada de Cayley

Si A es autoadjunto, entonces

$$U := I - 2i(A + i)^{-1}$$

es unitario. 

Demostración. Por las propiedades de los operadores autoadjuntos,

$$[(A + i)^{-1}]^* = (A - i)^{-1}.$$

Por lo tanto,

$$U^* = I + 2i(A - i)^{-1},$$

y U conmuta con U^* porque $(A - i)^{-1}$ y $(A + i)^{-1}$ conmutan. Para completar la demostración, observamos que

$$U^*U = I + 2i(A - i)^{-1} - 2i(A + i)^{-1} + 4(A - i)^{-1}(A + i)^{-1}.$$

5. El Teorema Espectral

Por la primera fórmula del resolvente,

$$2i(A - i)^{-1} - 2i(A + i)^{-1} + 4(A - i)^{-1}(A + i)^{-1} = 0.$$

Por lo tanto, $U^*U = I$, lo que demuestra que U es unitario. ■

Demostración del Teorema espectral

Demostración. Dado A autoadjunto, sea U el operador unitario definido por la transformada de Cayley. Del Teorema ??, obtenemos la descomposición $\mathcal{H} = \bigoplus H_k$, con una secuencia correspondiente de medidas finitas ν_k en \mathbb{S} y mapas unitarios $W_k : L^2(\mathbb{S}, \nu_k) \rightarrow H_k$, tales que

$$W_k^{-1}UW_k = M_z,$$

donde z es la coordenada compleja en \mathbb{S} .

El operador $I - U = 2i(A + i)^{-1}$ es inyectivo en \mathcal{H} . Por lo tanto, M_{1-z} es inyectivo en cada componente de $L^2(\mathbb{S}, \nu_k)$, lo que implica que $\nu_k\{1\} = 0$ para cada k . Podemos usar la inversa de la transformada de Cayley para definir el push-forward de ν_k a una medida de Borel finita en \mathbb{R} ,

$$\mu_k := \eta_*\nu_k.$$

Existe un mapa unitario correspondiente $\Psi_k : L^2(\mathbb{R}, d\mu_k) \rightarrow L^2(\mathbb{S}, d\nu_k)$ dado por el pullback $\phi \mapsto \phi \circ \eta$. Definimos $(X, \mu) = \bigcup_k (\mathbb{R}, \mu_k)$, y el mapa unitario

$$Q : L^2(X, d\mu) \rightarrow \mathcal{H}$$

por $Q = \bigoplus_k Q_k$ donde $Q_k := W_k\Psi_k : L^2(\mathbb{R}, d\mu_k) \rightarrow H_k$.

En X definimos la función coordenada $\alpha : X \rightarrow \mathbb{R}$ dada por $\alpha_k(x) = x$ en cada copia de \mathbb{R} indexada por k . Para probar que $Q(\mathcal{D}(M_\alpha)) \subset \mathcal{D}(A)$, basta considerar cada copia de \mathbb{R} por separado.

Para mostrar que $Q(\mathcal{D}(M_\alpha)) \subset \mathcal{D}(A)$, consideramos $f \in \mathcal{D}(M_\alpha)$ y observamos que

$$Q^{-1}AQf = AQ^{-1}Qf = Af.$$

Como A es autoadjunto, esto implica que $Qf \in \mathcal{D}(A)$, por lo tanto $Q(\mathcal{D}(M_\alpha)) \subset \mathcal{D}(A)$.

Ahora, supongamos que $v \in \mathcal{H}$ y pertenece a $\mathcal{D}(A)$. Para demostrar que $v \in Q(\mathcal{D}(M_\alpha))$, consideramos el vector v en la descomposición $\mathcal{H} = \bigoplus H_k$, y aplicamos el mapa unitario Q :

$$v = Qf = \bigoplus_k Q_k f_k,$$

donde $f = \bigoplus_k f_k$ y cada $f_k \in L^2(\mathbb{R}, d\mu_k)$. La relación entre A y M_α se establece observando que

$$Av = AQf = QM_\alpha f,$$

lo que implica que $f \in \mathcal{D}(M_\alpha)$ y $v \in Q(\mathcal{D}(M_\alpha))$. Por lo tanto, hemos demostrado que $\mathcal{D}(A) \subset Q(\mathcal{D}(M_\alpha))$.

Para completar la demostración del teorema, establecemos la equivalencia unitaria entre A y M_α . Consideramos $v \in \mathcal{D}(A)$ y observamos que

$$Q^{-1}Av = Q^{-1}AQQ^{-1}v = M_\alpha Q^{-1}v.$$

Esto muestra que $Q^{-1}AQ$ actúa como M_α en $Q^{-1}(\mathcal{D}(A)) = \mathcal{D}(M_\alpha)$, lo que completa la demostración del Teorema ??.

Para solidificar la relación entre A y M_α , consideremos $v \in \mathcal{D}(A)$. Ya hemos establecido que $Q^{-1}AQ$ actúa como M_α en $\mathcal{D}(M_\alpha)$. Específicamente, para cualquier $f \in \mathcal{D}(M_\alpha)$, tenemos

$$Q^{-1}AQf = M_\alpha f.$$

Esto implica que la acción de A en el espacio \mathcal{H} corresponde a la acción de M_α en el espacio $L^2(X, d\mu)$ a través del mapa unitario Q . Por lo tanto, hemos demostrado que A y M_α son unitariamente equivalentes.

Para concluir, enfatizamos que el conjunto de valores propios de A , denotado por $\sigma(A)$, coincide con el rango esencial de la función α . Esto se deduce del hecho de que las medidas μ_k tienen soporte dentro de $\sigma(A)$, lo que implica que cualquier valor en el espectro de A se refleja en el soporte de al menos una de las medidas μ_k . La relación unitaria entre A y M_α asegura que las propiedades espectrales de A se transfieren directamente a M_α y viceversa.

Este resultado es profundo ya que establece un puente entre los operadores autoadjuntos en espacios de Hilbert y los operadores de multiplicación en espacios de funciones, permitiendo una comprensión más profunda de la estructura espectral de dichos operadores. Además, la técnica de la transformada de Cayley utilizada aquí es un ejemplo poderoso de cómo las transformaciones de dominio pueden ser utilizadas para trasladar problemas entre diferentes contextos matemáticos, proporcionando así nuevas perspectivas y herramientas para su análisis.

La demostración del Teorema ?? queda así completada. ■

Ejemplo Ilustrativo: Operador de Multiplicación en $L^2(\mathbb{R})$

Consideremos el operador $A = M_x$ que actúa como multiplicación por la variable independiente en el espacio $L^2(\mathbb{R}, d\mu)$, donde $d\mu$ es la medida de Lebesgue. Este operador es autoadjunto y su espectro coincide con toda la línea real \mathbb{R} .

Aplicación de la Transformada de Cayley: La transformada de Cayley de A es $U = M_{\gamma(x)}$, donde $\gamma(x) = \frac{x-i}{x+i}$, y mapea la línea real \mathbb{R} al círculo unitario $\mathbb{S} \subset \mathbb{C}$. La transformada de Cayley convierte el operador de multiplicación M_x en un operador unitario en $L^2(\mathbb{S}, d\nu)$, donde $d\nu$ es la medida inducida por la transformada de Cayley.

Construcción de la Medida Espectral: Dado $f \in C(\mathbb{S})$, el valor esperado de $f(U)$ en el estado "vector unitario" $v \in L^2(\mathbb{R})$, normalizado adecuadamente, se calcula como

$$\langle v, f(U)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} f(\gamma(x)) |v(x)|^2 d\mu(x).$$

En este caso, la medida espectral producida por el Teorema Espectral es la medida estándar en el círculo $d\nu = \frac{d\theta}{2\pi}$, y el mapa unitario $W : L^2(\mathbb{S}, d\nu) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\mu)$ está definido por $f \mapsto f(U)v$.

Verificación de la Equivalencia Unitaria: El operador $Q : L^2(\mathbb{R}, d\mu_k) \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\mu)$, definido a través de la transformada de Cayley inversa y la estructura de la descomposición, actúa como $Q = M_v$, que es unitario como un mapa de $L^2(\mathbb{R}, d\mu_k)$ a $L^2(\mathbb{R}, d\mu)$. Dado que comenzamos con un operador de multiplicación, la conjugación de A por Q es trivial, es decir, $Q^{-1}M_xQ = M_x$.

5. El Teorema Espectral

Este ejemplo ilustra cómo la estructura del Teorema Espectral se manifiesta en un caso con multiplicidad trivial. La transformación de Cayley y el mapa unitario Q proporcionan una correspondencia explícita entre el operador autoadjunto original A y el operador de multiplicación M_α en el espacio transformado, revelando la estructura espectral subyacente de A de una manera muy concreta y computable.

Cálculo Funcional para Operadores Autoadjuntos

Hemos discutido previamente una forma continua del cálculo funcional para operadores unitarios. Una aplicación fundamental del cálculo funcional es para operadores autoadjuntos, abarcando una clase más amplia de funciones, incluyendo las funciones de Borel. Este enfoque es particularmente útil para definir proyecciones que aíslan diferentes partes del espectro y tiene múltiples aplicaciones en la teoría de ecuaciones diferenciales parciales, como en la construcción de operadores solución para ecuaciones. Por ejemplo, el operador del calor $e^{t\Delta}$ mapea datos iniciales a una solución de la ecuación del calor en \mathbb{R}^n .

El cálculo funcional que desarrollamos y la forma de operador de multiplicación del teorema espectral proporcionan herramientas equivalentes en esencia. Para operadores acotados, se puede derivar la forma de operador de multiplicación a partir del cálculo funcional mediante el Teorema de Representación de Riesz en \mathbb{R} . Para operadores no acotados, el enfoque es menos directo, lo que motiva nuestra elección de la forma de operador de multiplicación como versión principal del teorema espectral.

Las funciones de Borel en \mathbb{R} son aquellas funciones complejas cuya preimagen de un conjunto de Borel es también un conjunto de Borel. De acuerdo con la definición de medibilidad, si $g : X \rightarrow \mathbb{R}$ es medible y $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ es de Borel, entonces la composición $f \circ g$ es medible.

Se denota por $\mathcal{B}_b(\mathbb{R})$ el espacio de funciones de Borel acotadas de \mathbb{R} a \mathbb{C} . Para un operador autoadjunto A en \mathcal{H} y una función $f \in \mathcal{B}_b(\mathbb{R})$, definimos el operador acotado

$$f(A) := QM_{f \circ \alpha}Q^{-1},$$

donde $Q : L^2(X, d\mu) \rightarrow \mathcal{H}$ y $\alpha : X \rightarrow \mathbb{R}$ se establecen según los conceptos introducidos previamente.

Teorema 5.1.5. Cálculo Funcional para Operadores Autoadjuntos

Dado un operador autoadjunto A en \mathcal{H} , el mapa $\mathcal{B}_b(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(\mathcal{H})$ definido por $f \mapsto f(A)$ tiene propiedades significativas:

- El mapa es un *-homomorfismo, es decir, cumple que $fg(A) = f(A)g(A)$ y $f(A)^* = \bar{f}(A)$.
- Para toda $f \in \mathcal{B}_b(\mathbb{R})$, se tiene que $\|f(A)\| \leq \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |f(\lambda)|$, alcanzando la igualdad si f es continua.
- Si una secuencia $\{f_n\}$ converge puntualmente a f y $\sup |f_n| \leq M$ para todo n , entonces $f_n(A)$ converge a $f(A)$ en el sentido del operador fuerte, es decir, $f_n(A)v \rightarrow f(A)v$ para todo $v \in \mathcal{H}$.

Las demostraciones detalladas de estas propiedades y la demostración de la unicidad de este mapa están en [Bor20].



Este cálculo funcional proporciona una herramienta esencial para el análisis de operadores autoadjuntos y ofrece una comprensión profunda de su estructura espectral. Al aplicar este cálculo funcional, obtenemos una visión detallada de la dinámica de sistemas descritos por operadores autoadjuntos y sus aplicaciones en diversas áreas de las matemáticas.

Para operadores autoadjuntos A y funciones f pertenecientes a $C_b(\mathbb{R})$, el espacio de funciones continuas y acotadas en \mathbb{R} , se establece una conexión íntima entre el cálculo funcional y la aproximación del operador $f(A)$. La fórmula integral proporciona una representación concreta de $f(A)$ en términos de resolventes de A , lo que facilita su estudio y manipulación.

Teorema 5.1.6. Representación Integral de $f(A)$

Supongamos que A es autoadjunto y $f \in C_b(\mathbb{R})$. Entonces, $f(A)$ puede representarse como

$$f(A) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) [(A - \lambda - i\varepsilon)^{-1} - (A - \lambda + i\varepsilon)^{-1}] d\lambda,$$

donde el límite se toma en el sentido del operador fuerte. Si f es uniformemente continua, entonces el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$ existe en la topología de la norma del operador.



Demostración. La demostración de este teorema utiliza el cálculo funcional y la teoría espectral de operadores autoadjuntos. Los operadores $f_\varepsilon(A)$, que aparecen en el lado derecho de la expresión anterior, se definen a través de la integral

$$f_\varepsilon(x) := \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda) \left[\frac{1}{x - \lambda - i\varepsilon} - \frac{1}{x - \lambda + i\varepsilon} \right] d\lambda = \frac{\varepsilon}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(\lambda)}{(x - \lambda)^2 + \varepsilon^2} d\lambda.$$

La diferencia $f(x) - f_\varepsilon(x)$, evaluada a través del cambio de variables $x = \lambda - \varepsilon t$, es

$$f(x) - f_\varepsilon(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{f(x) - f(x + \varepsilon t)}{t^2 + 1} dt.$$

Bajo la suposición de que f es continua, y aplicando el teorema de convergencia dominada, se establece que $f_\varepsilon \rightarrow f$ puntualmente a medida que $\varepsilon \rightarrow 0$, y que la norma L^∞ de f_ε está acotada por la norma L^∞ de f . Esto conduce al límite en el sentido del operador fuerte.

Si f es adicionalmente uniformemente continua, la convergencia de f_ε a f es uniforme, permitiendo concluir que la convergencia del operador también es uniforme en la topología de la norma del operador. Los detalles completos de la demostración se encuentran en [Bor20]. ■

Este teorema proporciona una poderosa herramienta para el estudio de operadores autoadjuntos en espacios de Hilbert, permitiendo representar y aproximar los operadores funcionales de manera efectiva y manejable.

5.2. Descomposición Espectral para Operadores Autoadjuntos

En esta sección exploramos diversas descomposiciones del espectro de un operador autoadjunto A . Ya hemos introducido el espectro puntual $\sigma_{\text{pt}}(A)$, que consiste en los autovalores de A .

Para identificar otros componentes del espectro, utilizamos el cálculo funcional para crear proyecciones. A cada subconjunto de Borel $E \subset \mathbb{R}$, asociamos una proyección ortogonal

$$\Pi_E := \chi_E(A),$$

definida conforme a un teorema previo de cálculo funcional. Esto genera una familia de proyecciones, colectivamente denominada la resolución espectral de A . A continuación, se muestra cómo el espectro y el soporte de Π están relacionados.

Teorema 5.2.1. Relación entre el Espectro y el Soporte de Π

Para un operador autoadjunto A , un punto $\lambda \in \mathbb{R}$ se encuentra en $\sigma(A)$ si y solo si $\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} \neq 0$ para todo $\varepsilon > 0$. Si $\Pi_{\{\lambda\}} \neq 0$, entonces λ es un autovalor y el rango de $\Pi_{\{\lambda\}}$ es el espacio propio correspondiente. 

Demostración. Definimos el espacio de medida (X, μ) , el mapa unitario $Q : L^2(X, d\mu) \rightarrow \mathcal{H}$, y la función $\alpha(x) := x$ de acuerdo con la resolución espectral de A . Para $E \subset \mathbb{R}$,

$$\Pi_E = Q^{-1} \chi_{\alpha^{-1}(E)} Q.$$

Por lo tanto, $\Pi_E \neq 0$ si y solo si $\mu(\{\alpha \in E\}) > 0$. La primera afirmación se sigue del hecho de que $\sigma(A)$ es el rango esencial de α .

Si $\phi \in \text{range}(\Pi_{\{\lambda\}})$, entonces $Q^{-1}\phi$ tiene soporte en $\alpha = \lambda$. Por lo tanto, $\alpha(Q^{-1}\phi) = \lambda(Q^{-1}\phi)$, lo que implica que $A\phi = \lambda\phi$. 

Espectro Discreto y Esencial

La primera subdivisión del espectro considera el rango de la proyección espectral Π cerca de un punto.

Definición 5.2.1. Espectro Esencial y Discreto

Para un operador autoadjunto A , el espectro esencial $\sigma_{\text{ess}}(A)$ es el conjunto de $\lambda \in \sigma(A)$ tal que $\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}$ tiene rango infinito para todo $\varepsilon > 0$. El espectro discreto $\sigma_{\text{disc}}(A)$ consiste en los $\lambda \in \sigma(A)$ para los cuales $\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}$ tiene rango finito para algún $\varepsilon > 0$. 

Las definiciones son complementarias, de modo que

$$\sigma(A) = \sigma_{\text{disc}}(A) \cup \sigma_{\text{ess}}(A)$$

es una unión disjunta. El espectro discreto es claramente un subconjunto del espectro puntual. La diferencia entre ambos es que un autovalor puede tener multiplicidad infinita o estar dentro del espectro esencial, considerándose en tal caso como parte del espectro puntual pero no del discreto.

5.2. Descomposición Espectral para Operadores Autoadjuntos

El criterio de Weyl para el espectro esencial se presenta en el siguiente teorema.

Teorema 5.2.2. Criterio de Weyl para el Espectro Esencial

Supongamos que A es un operador autoadjunto en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Un punto $z \in \mathbb{C}$ se encuentra en $\sigma_{\text{ess}}(A)$ si y solo si existe una secuencia $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ con $\|u_n\| = 1$, tal que $u_n \rightarrow 0$ en el sentido débil y

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - z)u_n\| = 0.$$



Demostración. Ya sabemos por un teorema anterior que no existe tal secuencia para $z \in \rho(A)$, por lo que solo es necesario considerar $\lambda \in \sigma(A)$. Si $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, el rango de $\Pi_{(\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n})}$ es infinito-dimensional para todo n . Por tanto, para cada n , podemos elegir un vector unitario $u_n \in \text{rango de } \Pi_{(\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n})}$ que sea ortogonal a u_1, \dots, u_{n-1} . Una secuencia ortonormal converge débilmente a 0. Además, el hecho de que $u_n \in \text{rango de } \Pi_{(\lambda - \frac{1}{n}, \lambda + \frac{1}{n})}$ implica que

$$\|(A - \lambda)u_n\| < \frac{1}{n}.$$

Por lo tanto, $(A - \lambda)u_n \rightarrow 0$.

Supongamos ahora que $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$ y elijamos $\varepsilon > 0$ de tal manera que $\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}$ tenga rango finito. Sea $\{e_1, \dots, e_k\}$ una base para el rango de $\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}$, de modo que

$$\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}u = \sum_{j=1}^k \langle u, e_j \rangle e_j.$$

Sea $\{u_n\}$ una secuencia en $\mathcal{D}(A)$ con $\|u_n\| = 1$. Si $u_n \rightarrow 0$ débilmente, entonces en particular

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle u_n, e_j \rangle = 0$$

para todo $j \in \mathbb{N}$. Por lo tanto,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}u_n\| = 0.$$

Dado que A conmuta con Π_E , podemos usar la descomposición ortogonal para estimar

$$\begin{aligned} \|(A - \lambda)u_n\| &= \|(A - \lambda)(1 - \Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)})u_n\| + \|(A - \lambda)\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}u_n\| \\ &\geq \varepsilon\|(1 - \Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)})u_n\| - \varepsilon\|\Pi_{(\lambda - \varepsilon, \lambda + \varepsilon)}u_n\|. \end{aligned}$$

Por lo anterior, esto implica que

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n\| \geq \varepsilon.$$

Por lo tanto, los criterios para $\{u_n\}$ no pueden satisfacerse para $\lambda \in \sigma_{\text{disc}}(A)$. ■

La secuencia $\{u_n\}$ que aparece en el Teorema de Weyl se llama secuencia de Weyl para λ . Si A es la clausura de un operador esencialmente autoadjunto

5. El Teorema Espectral

A_0 , entonces es suficiente considerar secuencias de Weyl en $\mathcal{D}(A_0)$. En otras palabras, es suficiente considerar funciones en un dominio núcleo para A . Para ver esto, supongamos que $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ es una secuencia de Weyl para λ . Debido a que A es la clausura de A_0 , para cada n , podemos encontrar $w_n \in \mathcal{D}(A_0)$ tal que $\|w_n - u_n\| \leq 1/n$ y $\|Aw_n - Au_n\| \leq 1/n$. La secuencia $\{w_n/\|w_n\|\}$ proporciona entonces una secuencia de Weyl para λ contenida en $\mathcal{D}(A_0)$.

El término "espectro esencial" se explica mediante el siguiente corolario al Teorema de Weyl. Dado que los operadores compactos mapean secuencias débilmente convergentes a secuencias fuertemente convergentes, la adición de un operador compacto no afecta la existencia de secuencias de Weyl. Esto conduce a la prueba del siguiente teorema.

Teorema 5.2.3. Estabilidad de Weyl

Supongamos que A y B son operadores autoadjuntos, con B compacto. Entonces,

$$\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A).$$



Demostración. Sea $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A + B)$. Por definición, para todo $n \in \mathbb{N}$, existe una secuencia $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(A + B)$ con $\|u_n\| = 1$ tal que $u_n \rightarrow 0$ en el sentido débil y

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A + B - \lambda)u_n\| = 0.$$

Dado que B es compacto, la imagen de cualquier secuencia débilmente convergente bajo B es fuertemente convergente. Por lo tanto, $\{Bu_n\}$ tiene una subsucesión convergente. Sin pérdida de generalidad, asumimos que $\{Bu_n\}$ en sí misma converge. Así, existe $v \in \mathcal{H}$ tal que $Bu_n \rightarrow v$.

Observamos que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A + B - \lambda)u_n - Bu_n\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A + B - \lambda)u_n\| + \lim_{n \rightarrow \infty} \|Bu_n - v\| = 0.$$

Esto implica que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, ya que hemos encontrado una secuencia $\{u_n\}$ que satisface las condiciones para ser una secuencia de Weyl para A y λ .

Recíprocamente, supongamos que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$. Entonces, existe una secuencia $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(A)$ con $\|u_n\| = 1$, $u_n \rightarrow 0$ débilmente y

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n\| = 0.$$

Nuevamente, como B es compacto, existe una subsucesión de $\{Bu_n\}$ (que por simplicidad seguimos denotando por $\{Bu_n\}$) que converge en \mathcal{H} . Llamemos v al límite de $\{Bu_n\}$. Entonces,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|(A + B - \lambda)u_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n + Bu_n\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \|(A - \lambda)u_n\| + \lim_{n \rightarrow \infty} \|Bu_n - v\| = 0.$$

Por lo tanto, $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A + B)$, lo que demuestra que $\sigma_{\text{ess}}(A + B) \subseteq \sigma_{\text{ess}}(A)$.

Habiendo demostrado ambas inclusiones, concluimos que $\sigma_{\text{ess}}(A + B) = \sigma_{\text{ess}}(A)$. ■

5.3. Espectro Continuo y Descomposición Espectral

En esta sección, clasificamos el espectro de un operador autoadjunto A a través de las propiedades de las medidas asociadas. Según el teorema de

5.3. Espectro Continuo y Descomposición Espectral

descomposición de Lebesgue, una medida regular de Borel μ en \mathbb{R} admite una descomposición única de la forma,

$$\mu = \mu_{\text{pp}} + \mu_{\text{ac}} + \mu_{\text{sc}},$$

donde μ_{pp} es una medida de punto puro (una suma de medidas puntuales), μ_{ac} es absolutamente continua con respecto a la medida de Lebesgue, y μ_{sc} es continua singular.

Dado que el espacio de medida (X, μ) proporcionado por el teorema espectral consiste en copias de \mathbb{R} equipadas con medidas de Borel finitas, podemos derivar de la descomposición de Lebesgue la descomposición,

$$L^2(X, d\mu) = L^2(X, d\mu_{\text{pp}}) \oplus L^2(X, d\mu_{\text{ac}}) \oplus L^2(X, d\mu_{\text{sc}}).$$

La correspondiente descomposición de \mathcal{H} se denota,

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{pp}} \oplus \mathcal{H}_{\text{ac}} \oplus \mathcal{H}_{\text{sc}}.$$

Basándonos en esta subdivisión, la porción continua del espectro puede descomponerse en conjuntos disjuntos,

$$\sigma_{\text{cont}}(A) := \sigma_{\text{ac}}(A) \cup \sigma_{\text{sc}}(A),$$

donde

$$\sigma_{\text{ac}}(A) := \sigma(A|_{\mathcal{H}_{\text{ac}}}), \quad \sigma_{\text{sc}}(A) := \sigma(A|_{\mathcal{H}_{\text{sc}}}).$$

Es importante notar que el espectro puntual $\sigma_{\text{pt}}(A)$, el conjunto de autovalores, no es necesariamente cerrado. Por otro lado, el espectro de la restricción $A|_{\mathcal{H}_{\text{pp}}}$ es cerrado por definición. De hecho, es fácil verificar que

$$\sigma(A|_{\mathcal{H}_{\text{pp}}}) = \overline{\sigma_{\text{pt}}(A)}.$$

Esta afirmación se sigue de la teoría subyacente. Por lo tanto, la descomposición de medidas lleva a la partición,

$$\sigma(A) = \overline{\sigma_{\text{pt}}(A)} \cup \sigma_{\text{ac}}(A) \cup \sigma_{\text{sc}}(A),$$

como una alternativa a la descomposición anterior.

A diferencia del espectro esencial, la descomposición anterior es inestable bajo perturbaciones compactas. Un notable teorema de Weyl y von Neumann dice que para cualquier operador autoadjunto acotado, existe una perturbación compacta (de hecho, de Hilbert-Schmidt) tal que el operador perturbado tiene espectro de punto puro. Por otro lado, Kato demostró que el espectro absolutamente continuo es estable bajo perturbaciones de clase traza.

Para $v \in \mathcal{H}$, la resolución espectral se puede utilizar para asociar una medida espectral a un vector $v \in \mathcal{H}$, estableciendo

$$\mu_v(E) := \langle v, \Pi_E v \rangle$$

para un conjunto de Borel $E \subset \mathbb{R}$. La integración respecto a la medida espectral está relacionada con el cálculo funcional mediante

$$\langle v, f(A)v \rangle = \int_{\mathbb{R}} f d\mu_v$$

5. El Teorema Espectral

para $f \in \mathcal{B}_b(\mathbb{R})$. Esto es análogo a la fórmula para la medida espectral en el caso unitario.

Partiendo de la función cuadrática, podemos derivar la forma sesquilineal correspondiente $h(v, w) = \langle v, f(A)w \rangle$ utilizando la identidad de polarización como antes. Por el lema de Riesz, el operador $f(A)$ está determinado de manera única por el conjunto de elementos de matriz $\langle v, f(A)v \rangle$. Por lo tanto, el cálculo funcional completo podría recuperarse a partir del conocimiento de la resolución espectral Π .

A nivel de operadores, la relación puede expresarse más directamente en términos de integración respecto a la medida proyección-valorada $E \mapsto \Pi_E$. Es decir, es posible definir la integración respecto a $d\Pi$, al igual que para una medida ordinaria. En términos de esta integral de operador, la fórmula es equivalente a

$$f(A) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d\Pi(\lambda).$$

No desarrollaremos aquí la teoría de la medida proyección-valorada. Para nuestros propósitos, basta considerar la expresión como una notación abreviada para la definición débil.

5.4. Principio Min-Max

El criterio de Weyl permite ubicar el espectro esencial sin conocimiento explícito del resolvente o de los proyectores espectrales. En ese sentido, es similar al principio max-min que establecimos para operadores compactos. Para operadores autoadjuntos generales, podemos formular una versión de este principio que ayuda a separar el fondo del espectro esencial de los autovalores discretos por debajo de él.

Teorema 5.4.1. Principio Min-Max

Sea A un operador autoadjunto cuyo espectro está acotado por debajo. Sea Λ_k el conjunto de subespacios de $\mathcal{D}(A)$ de dimensión k , y defina

$$\alpha_k := \min_{W \in \Lambda_k} \left\{ \max_{u \in W \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \right\}$$

para $k \in \mathbb{N}$. Entonces, para cada k , se sostiene una de las siguientes alternativas:

- (a) α_k es el k -ésimo autovalor (ordenado en forma creciente y contado con multiplicidad) y hay al menos k autovalores por debajo del espectro esencial.
- (b) $\alpha_k = \inf \sigma_{ess}(A)$ y hay a lo sumo $k - 1$ autovalores por debajo del espectro esencial.

Demostración. Para $c \in \mathbb{R}$, suponga que $\text{rank } \Pi_{(-\infty, c)} \geq k$. Dado que el espectro de A está acotado por debajo, se tiene que $\text{rango } \Pi_{(-\infty, c)} \subset \text{rango } \Pi_{(a, c)}$ para algún $a \in \mathbb{R}$. Por la caracterización de $\mathcal{D}(A)$, se sigue que

$$\text{rango } \Pi_{(-\infty, c)} \subset \mathcal{D}(A).$$

La suposición sobre el rango implica que existe un subespacio $W \in \Lambda_k$ tal que $W \subset \text{rango } \Pi_{(-\infty, c)}$. La restricción de A al rango $\Pi_{(-\infty, c)}$ está acotada por c , de modo que

$$\max_{u \in W \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \leq c.$$

Por lo tanto,

$$\alpha_k \leq c.$$

Ahora suponga que $\text{rank } \Pi_{(-\infty, c)} < k$. Entonces, para cada subespacio $W \in \Lambda_k$, existe algún vector $u \in W$ tal que

$$\langle u, Au \rangle > c\|u\|^2.$$

Esto implica que

$$\alpha_k \geq c.$$

Tomando el contrapositivo de estas afirmaciones, concluimos que para todo $\varepsilon > 0$,

$$\begin{aligned} \text{rank } \Pi_{(-\infty, \alpha_k - \varepsilon)} &< k, \\ \text{rank } \Pi_{(-\infty, \alpha_k + \varepsilon)} &\geq k. \end{aligned} \tag{5.6}$$

Se deduce que $\text{rank } \Pi_{(\alpha_k - \varepsilon, \alpha_k + \varepsilon)} \geq 1$ para todo $\varepsilon > 0$, lo que significa que $\alpha_k \in \sigma(A)$. Si $\Pi_{(\alpha_k - \varepsilon, \alpha_k + \varepsilon)}$ tiene rango finito para algún $\varepsilon > 0$, entonces $\alpha_k \in \sigma_{\text{disc}}(A)$, y se sigue de la ecuación que α_k es el k -ésimo autovalor.

Por otro lado, si $\Pi_{(\alpha_k - \varepsilon, \alpha_k + \varepsilon)}$ tiene rango infinito para algún $\varepsilon > 0$, entonces $\alpha_k \in \sigma_{\text{ess}}(A)$, por definición. La primera afirmación implica que ningún punto por debajo de α_k yace en $\sigma_{\text{ess}}(A)$, por lo que α_k es el fondo del espectro esencial. ■

Nota: Existe un principio max-min correspondiente. Es decir, el valor de α_k del Teorema también se puede calcular como

$$\alpha_k = \max_{v_1, \dots, v_{k-1} \in \mathcal{H}} \left\{ \min_{u \in \mathcal{D}(A) \cap \{v_1, \dots, v_{k-1}\}^\perp \setminus \{0\}} \frac{\langle u, Au \rangle}{\|u\|^2} \right\}.$$

Este enfoque ofrece una perspectiva alternativa y complementaria al enunciado en el Teorema, enfatizando la interrelación entre los aspectos 'min' y 'max' del espectro.

CAPÍTULO 6

Operadores de Schrödinger

En mecánica cuántica, el movimiento de una partícula única en \mathbb{R}^n se describe mediante una función de estado normalizada $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, de tal manera que $|\psi|^2$ es la densidad de probabilidad de la ubicación de la partícula. Cantidades observables como la energía y el momento se representan mediante operadores autoadjuntos (no acotados) en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Por ejemplo, la coordenada clásica x_j se representa mediante el operador de multiplicación M_{x_j} , y el componente de momento p_j por el diferencial $-i\hbar\partial_{x_j}$, donde \hbar es la constante de Planck. Los valores posibles de una observable están dados por el espectro del operador asociado, y la distribución de estos valores para un estado cuántico particular ψ corresponde a su descomposición espectral.

Para una partícula clásica de masa m , la energía cinética es $p^2/2m$. Si la energía potencial está representada por una función de valor real $V(x)$, la energía total clásica (llamada función Hamiltoniana) es

$$E := \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

La versión cuántica del Hamiltoniano, de acuerdo con la prescripción descrita anteriormente, es el operador

$$H := -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V$$

(con el potencial actuando por multiplicación).

Un operador de la forma H se denomina operador de Schrödinger. En 1926, Erwin Schrödinger aplicó el esquema de cuantificación descrito anteriormente al caso del electrón en un átomo de hidrógeno, donde $V(x)$ es el potencial de Coulomb para el campo eléctrico generado por un solo protón, supuesto fijo en el origen. En unidades gaussianas, este potencial está dado por

$$V(x) := -\frac{q^2}{r},$$

donde q es la carga elemental y $r := |x|$. Schrödinger demostró que el espectro del Hamiltoniano asociado tiene espectro discreto debajo de cero. Además, los autovalores corresponden precisamente a los niveles de energía que Niels Bohr había postulado para el hidrógeno atómico en 1913 para explicar las líneas de absorción y emisión del gas de hidrógeno observadas en el siglo XIX. Esta

6. Operadores de Schrödinger

derivación del resultado empírico a partir del espectro de H fue un gran logro para la nueva teoría mecánica cuántica.

Para fines matemáticos, generalmente escalamos las constantes físicas y escribimos un operador de Schrödinger como

$$H = -\Delta + V.$$

En este capítulo desarrollaremos la teoría espectral de los operadores de Schrödinger para varias clases de potenciales de valor real en \mathbb{R}^n . Aunque el caso $n = 3$ es de especial importancia, hay situaciones físicas, generalmente involucrando redes cristalinas, donde el movimiento de partículas está limitado a una o dos dimensiones. Además, los sistemas con múltiples partículas interactuantes se describen mediante operadores de Schrödinger en espacios de dimensiones superiores.

Si asumimos que el potencial V es de valor real y localmente L^2 , entonces H está bien definido como un operador simétrico en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Como hemos visto en los ejemplos anteriores, el Laplaciano en sí es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, con el dominio de la extensión autoadjunta dado por $H^2(\mathbb{R}^n)$. Por lo tanto, bajo la suposición adicional de que V es acotado, el lema correspondiente implica que H es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ y autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^n)$.

Estas suposiciones sobre el potencial son demasiado restrictivas para muchos problemas en mecánica cuántica. El potencial de Coulomb, que es singular y no acotado, es un ejemplo de esto. Establecer extensiones autoadjuntas para una amplia clase de potenciales que incluye los casos físicos importantes es un objetivo fundamental en la teoría de operadores de Schrödinger. Si podemos demostrar que un operador Hamiltoniano cuántico es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, entonces su espectro está canónicamente definido y no depende de otras elecciones.

Potenciales Positivos

Dado que el Laplaciano es un operador positivo, es posible establecer la autoadjunción esencial de $-\Delta + V$ bajo condiciones bastante generales cuando $V \geq 0$. Esta sección se enfocará en dicha autoadjunción para el caso $V \geq 0$.

Autoadjunción Esencial

La autoadjunción esencial de $-\Delta + V$ en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ puede demostrarse para $V \geq 0$ estableciendo que $(-\Delta + V)^* + 1$ es inyectivo. Se examinará el caso en el que V es localmente acotado.

Teorema 6.0.1. Autoadjunción Esencial para Potenciales Localmente Acotados

Sea $V \in L_{\text{loc}}^\infty(\mathbb{R}^n)$ de valor real con $V \geq 0$. Entonces, $-\Delta + V$ es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. 

Demostración. Defina $A = -\Delta + V$ con dominio $\mathcal{D}(A) = C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, y considere $u \in \mathcal{D}(A^*)$. Buscamos demostrar que u es al menos localmente H^2 .

Para $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, es evidente que $\psi u \in \mathcal{D}(A^*)$. Esto implica que $(-\Delta + V)\psi u \in L^2(\mathbb{R}^n)$, con la derivada definida en sentido débil. La suposición

de que V es localmente acotado nos lleva a concluir que $-\Delta(\psi u) \in L^2(\mathbb{R}^n)$. La transformada de Fourier muestra que $|\xi|^2 \widehat{\psi u} \in L^2(\mathbb{R}^n)$, implicando que $\psi u \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Esto prueba que

$$\mathcal{D}(A^*) \subset H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^n).$$

El objetivo principal es demostrar que $A^* + 1$ es inyectivo. Para $u \in \mathcal{D}(A^*)$, asumimos por contradicción que

$$(A^* + 1)u = 0.$$

Esto implica que

$$\langle u, (-\Delta + V + 1)\phi \rangle = 0$$

para todo $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Es decir, u es una solución débil de la ecuación correspondiente. Dado que $u \in H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^n)$, para $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, la aproximación de $\chi^2 u$ por funciones en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ permite mostrar que

$$\langle u, (-\Delta + V + 1)\chi^2 u \rangle = 0.$$

La condición $V \geq 0$ conduce a

$$\|\chi u\|^2 \leq \langle u, \Delta(\chi^2 u) \rangle.$$

La fórmula de Green indica que

$$\begin{aligned} \langle u, \Delta(\chi^2 u) \rangle &= \|u \nabla \chi\|^2 - \|\nabla(\chi u)\|^2 \\ &\leq \|u \nabla \chi\|^2. \end{aligned}$$

Así, tenemos

$$\|\chi u\|^2 \leq \|u \nabla \chi\|^2.$$

Considerando $\chi(x)$ como una función del tipo $h(|x| - R)$, con $h(t) = 1$ para $t \leq 1$ y $h(t) = 0$ para $t \geq 2$, el límite de $R \rightarrow \infty$ muestra que $u = 0$.

Concluimos que $A^* + 1$ es inyectivo, lo que demuestra que A es esencialmente autoadjunto.

La mejora del resultado bajo la hipótesis más débil de que $V \in L_{\text{loc}}^2(\Omega)$ se basa en un resultado de la teoría de distribuciones conocido como la desigualdad de Kato. ■

Extensión de Forma Cuadrática

Otro enfoque para el problema de la extensión autoadjunta de $-\Delta + V$ es el método de extensión de Friedrichs, discutido en la Sección ???. Definir extensiones en términos de formas cuadráticas tiene la gran ventaja de que los dominios de forma son generalmente más simples que los dominios de los operadores correspondientes.

El método de Friedrichs proporciona un complemento útil a los argumentos directos utilizados en la sección anterior. Aunque el Teorema ??? no proporciona información sobre el dominio exacto del operador, sí establece la crucial propiedad de autoadjunción esencial. El método de Friedrichs se aplica de manera más general y proporciona una descripción del dominio del operador, pero deja la autoadjunción esencial como una cuestión separada.

Formulación del Problema y Resultado Principal

6. Operadores de Schrödinger

Teorema 6.0.2. Autoadjunción Esencial para Potenciales No Negativos

Sea $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ de valor real con $V \geq 0$. Entonces, el espacio

$$\mathcal{H}_Q := \left\{ f \in H^1(\mathbb{R}^n) : V^{\frac{1}{2}} f \in L^2(\mathbb{R}^n) \right\}$$

es un espacio de Hilbert con respecto al producto interno

$$Q[f, g] := \langle f, g \rangle_{H^1} + \langle f, Vg \rangle.$$

Existe una extensión autoadjunta de $-\Delta + V$, con dominio

$$\mathcal{D}(-\Delta + V) := \left\{ u \in \mathcal{H}_Q : f \mapsto Q[u, f] \text{ se extiende a } L^2(\mathbb{R}^n) \right\},$$

como funcional acotado, tal que

$$Q[f, g] = \langle f, (-\Delta + V + 1)g \rangle$$

para todo $f, g \in \mathcal{D}(-\Delta + V)$.



Demostración. Completitud de \mathcal{H}_Q . Dado que $V \geq 0$, está claro que $Q[\cdot, \cdot]$ define un producto interno. Para demostrar la completitud, supongamos que $\{u_n\} \subset \mathcal{D}(-\Delta + V)$ es una sucesión de Cauchy con respecto a la norma $\|\cdot\|_Q$ asociada con Q . Debido a que

$$\|u\|_{H^1} \leq \|u\|_Q,$$

$\{u_n\}$ es de Cauchy y, por lo tanto, converge a algún $u \in H^1(\mathbb{R}^n)$.

Dado que

$$\|(V + 1)^{\frac{1}{2}} f\| \leq \|f\|_Q,$$

$\{(V + 1)^{\frac{1}{2}} u_n\}$ también es de Cauchy con respecto a L^2 . Por lo tanto, existe algún $h \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que

$$(V + 1)^{\frac{1}{2}} u_n \rightarrow h$$

en el sentido L^2 . Esto implica que $u_n \rightarrow (V + 1)^{-\frac{1}{2}} h$ en $L^2(\mathbb{R}^n)$ también, lo que implica que $u = (V + 1)^{-\frac{1}{2}} h$. Dado que h es L^2 , tenemos que $u \in \mathcal{H}_Q$, y la combinación de la convergencia en H^1 y la relación anterior implica que $u_n \rightarrow u$ con respecto a $\|\cdot\|_Q$. Por lo tanto, \mathcal{H}_Q es completo.

Definición de $-\Delta + V$. Para $u \in \mathcal{D}(-\Delta + V)$, el lema de Riesz define un único $w \in L^2(\mathbb{R}^n)$ tal que

$$Q[u, f] = \langle w, f \rangle$$

para todo $f \in \mathcal{H}_Q$. Luego definimos

$$(-\Delta + V)u := w - u.$$

La prueba de la autoadjunción ahora sigue el mismo argumento utilizado en el Teorema ??, es decir, utilizamos el lema de Riesz en \mathcal{H}_Q para establecer la sobreyectividad de $-\Delta + V$, lo que implica que $\mathcal{D}((-\Delta + V)^*) \subset \mathcal{D}(-\Delta + V)$.

Dominio de Forma de $-\Delta + V$. El espacio \mathcal{H}_Q definido anteriormente se llama el dominio de forma de $-\Delta + V$. Aunque está claro que $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ está contenido en \mathcal{H}_Q , es posible que el dominio de $-\Delta + V$ dado no incluya a $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Esto se debe a que $V\psi$ puede no estar contenido en $L^2(\mathbb{R}^n)$ para $V \in L^1_{\text{loc}}$ y $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. ■

El Teorema ?? ilustra la principal ventaja del método de Friedrichs, a saber, la facilidad de trabajar con dominios de forma cuadrática. Como subespacio de $L^2(\mathbb{R}^n)$,

$$\mathcal{H}_Q = H^1(\mathbb{R}^n) \cap \mathcal{D}(M_{V^{1/2}})$$

En otras palabras, el dominio de forma cuadrática de $-\Delta + V$ es simplemente la intersección de los dominios de forma de $-\Delta$ y M_V . Por el lado del operador, el dominio $\mathcal{D}(-\Delta + V)$ no tiene conexión directa con $\mathcal{D}(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n)$ y de hecho puede ser disjunto de él.

Cuando $V \in L^\infty_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ (asumiendo todavía $V \geq 0$), es fácil ver desde la relación anterior que $C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{D}(-\Delta + V)$. Dado que la autoadjunción esencial implica la unicidad de la extensión, los dos métodos producen el mismo resultado cuando V satisface ambas hipótesis.

6.1. Espectro Discreto

La evolución de estados en mecánica cuántica es descrita por la ecuación de Schrödinger para un estado cuántico Ψ ,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H \Psi,$$

donde $H = -\Delta + V$ es el Hamiltoniano cuántico. Las autofunciones de H corresponden a soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger. Intuitivamente, esperamos que tales soluciones estables ocurran solo en energías para las cuales la partícula clásica correspondiente está atrapada, es decir, que su movimiento esté confinado a una región compacta. El atrapamiento ocurre en energías E para las cuales el conjunto $\{V(x) \leq E\}$ es acotado.

En el caso de que $V \rightarrow \infty$ en el infinito, las partículas clásicas están atrapadas a todas las energías. Por lo tanto, esperaríamos que el operador de Schrödinger tenga un espectro puramente discreto bajo esta condición.

Teorema 6.1.1. Espectro Discreto para Potenciales que Tienen a Infinito

Sea $V \in L^1_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ con $V \geq 0$, y sea $-\Delta + V$ el operador autoadjunto como en el Teorema ?. Si $V(x) \rightarrow \infty$ cuando $x \rightarrow \infty$, entonces $-\Delta + V$ tiene resolvente compacto y espectro puramente discreto.

Demostración. Definamos el espacio de Hilbert \mathcal{H}_Q con la forma cuadrática $Q[\cdot, \cdot]$ como en la prueba del Teorema ??, y sea $A = -\Delta + V$ el operador autoadjunto definido de tal manera que

$$Q[u, v] = \langle u, (A + 1)v \rangle$$

para $u \in \mathcal{D}(A)$ y $v \in \mathcal{H}_Q$. Si establecemos $u = v = (A + 1)^{-1}f$ para $f \in L^2$, entonces

$$\|u\|_Q^2 = \langle (A + 1)^{-1}f, f \rangle.$$

Supongamos que $\{f_k\}$ es una secuencia acotada en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Nuestro objetivo es demostrar que la secuencia $u_k := (A + 1)^{-1}f_k$ tiene una subsucesión convergente en $L^2(\mathbb{R}^n)$, lo que establecerá que $(A + 1)^{-1}$ es un operador compacto.

6. Operadores de Schrödinger

Por la relación anterior, la secuencia u_k está acotada en \mathcal{H}_Q . Para $m \in \mathbb{N}$, definamos $\chi_m \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ como una función de corte definida de tal manera que

$$\chi_m(x) = \begin{cases} 1, & \text{si } |x| \leq m, \\ 0, & \text{si } |x| \geq m+1. \end{cases}$$

Para cada m , la secuencia $\{\chi_m u_k\}_{k=1}^\infty$ está acotada en $H_0^1(B(0; R+1))$, ya que $\|\cdot\|_{H^1} \leq \|\cdot\|_Q$.

Aplicando el teorema de Rellich a $\{\chi_1 u_k\}$ obtenemos una subsucesión $\{u_{1,j}\} \subset \{u_k\}$ para la cual $\{\chi_1 u_{1,j}\}$ converge en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Luego aplicamos el teorema de Rellich a $\{\chi_2 u_{1,j}\}$ para producir una subsucesión $u_{2,j}$ tal que $\{\chi_2 u_{2,j}\}$ converge, y así sucesivamente. El resultado es un conjunto anidado de subsucesiones $\{u_{l+1,j}\} \subset \{u_{l,j}\}$ tal que $\{\chi_l u_{l,j}\}$ converge en $L^2(\mathbb{R}^n)$ a medida que $j \rightarrow \infty$. Luego definimos $w_j := u_{j,j}$. Por construcción, para cada m , la secuencia cortada $\{\chi_m w_j\}$ converge en $L^2(\mathbb{R}^n)$ a medida que $j \rightarrow \infty$.

Dado que la secuencia $\{u_k\}$ estaba acotada en \mathcal{H}_Q , también tenemos una cota uniforme $\|w_j\|_Q \leq M$ para todos los j . Esto implica en particular que

$$\|V^{\frac{1}{2}} w_j\| \leq M.$$

Dado $\varepsilon > 0$, la hipótesis sobre V nos permite elegir m suficientemente grande de modo que

$$\inf_{|x| \geq m} V(x) \geq \frac{1}{\varepsilon}.$$

Esto implica

$$\|(1 - \chi_m) w_j\|^2 \leq \varepsilon M^2,$$

para todo j . Ya que $\chi_m w_j$ es convergente en L^2 , existe un $N > 0$ tal que $i, j \geq N$ implica

$$\|\chi_m(w_i - w_j)\| \leq \varepsilon.$$

Combinando esto con la relación anterior obtenemos

$$\begin{aligned} \|w_i - w_j\| &\leq \|\chi_m(w_i - w_j)\| + \|(1 - \chi_m) w_i\| + \|(1 - \chi_m) w_j\| \\ &\leq \varepsilon + 2M\sqrt{\varepsilon}, \end{aligned}$$

para $i, j \geq N$. Dado que ε era arbitrario, esto demuestra que $\{w_j\}$ es una sucesión de Cauchy y, por lo tanto, convergente en $L^2(\mathbb{R}^n)$.

Por lo tanto, el operador $(A+1)^{-1}$ es compacto, y la discreción del espectro se sigue del Teorema ??.

En esta sección, hemos formalizado y demostrado que bajo ciertas condiciones sobre el potencial V , el operador $-\Delta + V$ posee un espectro puramente discreto. Esta propiedad es crucial en el estudio de sistemas cuánticos donde las partículas están confinadas a regiones específicas en el espacio.

6.2. Oscilador Armónico Cuántico

El oscilador armónico clásico describe el movimiento de una partícula sujeta a una fuerza restauradora proporcional a su desplazamiento del origen. La correspondiente función de energía potencial es cuadrática. El análogo mecánico

cuántico de este sistema (con la constante de Planck escalada) es un operador de Schrödinger $-\Delta + V$, actuando en $L^2(\mathbb{R}^n)$, con un potencial dado por

$$V(x) = \sum_{i,j=1}^n x_i M_{ij} x_j,$$

donde M es una matriz definida positiva. El operador $-\Delta + V$ es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R})$ y tiene un espectro puramente discreto.

Espectro del Oscilador Armónico Cuántico

Consideremos el oscilador armónico cuántico con un potencial como el descrito previamente. El espectro de este oscilador está dado por

$$\sigma(-\Delta + V) = \left\{ \sum_{i=1}^n (2k_i + 1)\omega_i : k_i \in \mathbb{N}_0 \right\},$$

donde $\omega_1^2, \dots, \omega_n^2$ denotan los autovalores de M con $\omega_j > 0$. Utilizando un cambio de variables lineal para diagonalizar M , podemos asumir que

$$V(x) = \sum_{j=1}^n \omega_j^2 x_j^2.$$

La separación de variables nos permite reducir la ecuación de autovalores a una suma de ecuaciones unidimensionales. También es suficiente considerar el caso $\omega_j = 1$, ya que el coeficiente puede tenerse en cuenta mediante el reescalamiento de la variable. Así, nos enfocamos en el operador unidimensional

$$H := -\Delta + x^2,$$

definido como un operador autoadjunto en $L^2(\mathbb{R})$ por la extensión única descrita previamente.

Para determinar los autovalores de H , resulta conveniente introducir un par de operadores auxiliares,

$$A^\pm := -i\partial_x \pm ix.$$

Como operadores diferenciales, tenemos las relaciones

$$A^+ A^- = H - 1, \quad A^- A^+ = H + 1.$$

Los operadores A^+ y A^- se llaman operadores de ascenso y descenso, respectivamente. Esta terminología se justifica por el siguiente lema:

Lema 6.2.1. Operadores de Ascenso y Descenso

Sea ψ una autofunción de H con autovalor λ . Entonces ψ es suave, $A^\pm \psi \in \mathcal{D}(H)$ y

$$H(A^\pm \psi) = (\lambda \pm 2)A^\pm \psi.$$



Demostración. Primero demostramos que ψ es suave, mediante un argumento de regularidad elíptica. Para $f \in L^2(\mathbb{R})$, afirmamos que

$$-\Delta f \in H^m(\mathbb{R}) \text{ implica } f \in H^{m+2}(\mathbb{R}).$$

6. Operadores de Schrödinger

Esto es una consecuencia inmediata de la caracterización de los espacios de Sobolev y el hecho de que la transformada de Fourier convierte $-\Delta$ en multiplicación por $|\xi|^2$.

Como se señaló en la demostración previa, $\mathcal{D}(H) \subset H_{\text{loc}}^2(\mathbb{R})$, así que esta es nuestra suposición inicial para ψ . Supongamos, por inducción, que $\psi \in H_{\text{loc}}^m(\mathbb{R})$ con $m \geq 2$. Para $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, entonces tenemos

$$-\Delta(\chi\psi) = (\lambda - x^2)\chi\psi - [\Delta, \chi]\psi.$$

Dado que $[\Delta, \chi]$ es un operador diferencial de primer orden, con coeficientes suaves, el lado derecho está contenido en $H^{m-1}(\mathbb{R})$ por la hipótesis inductiva. Por lo tanto, $\chi\psi \in H^{m+1}(\mathbb{R})$. Por inducción, esto demuestra que $\psi \in H_{\text{loc}}^m(\mathbb{R})$ para todo $m \in \mathbb{N}$, lo que prueba que $\psi \in C^\infty(\mathbb{R})$ por la inclusión de Sobolev.

Como operadores diferenciales, H y A^\pm satisfacen una fórmula conmutativa,

$$[H, A^\pm] = \pm 2A^\pm.$$

Aplicando esto a la autofunción $\psi \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ obtenemos

$$H(A^\pm\psi) = A^\pm(H \pm 2)\psi = (\lambda \pm 2)A^\pm\psi.$$

Nota que solo hemos demostrado que esto se cumple como ecuación diferencial. Todavía necesitamos verificar que $A^\pm\psi \in \mathcal{D}(H)$.

Por la caracterización del dominio de forma cuadrática dado previamente, está claro que $\psi \in H^1(\mathbb{R})$ y $x\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Por lo tanto, tenemos $A^\pm\psi \in L^2(\mathbb{R})$. Para $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$, podemos integrar por partes para estimar

$$|\langle A^\pm\psi, Hf \rangle| = |\langle (\lambda \pm 2)A^\pm\psi, f \rangle| \leq C\|f\|.$$

Esto muestra que $A^\pm\psi$ está contenido en $\mathcal{D}(H)$. ■

Este lema conduce rápidamente a una caracterización explícita del espectro en una dimensión.

Corolario 6.2.1. Espectro del Oscilador Armónico Unidimensional

El oscilador armónico unidimensional tiene espectro

$$\sigma(-\Delta + x^2) = 2\mathbb{N}_0 + 1,$$

y una base ortonormal $\{\psi_k\}_{k=0}^\infty$ de autofunciones

$$\psi_k(x) := \pi^{-\frac{1}{4}} 2^{-\frac{k}{2}} (k!)^{-\frac{1}{2}} (A^-)^k e^{-\frac{x^2}{2}},$$

donde $\lambda_k = 2k + 1$.



Demostración. Supongamos que $H\psi = \lambda\psi$ para $\psi \in \mathcal{D}(H)$. Dado que ψ es suave, podemos integrar por partes para obtener

$$\|A^-\psi\|^2 = \langle \psi, A^+A^-\psi \rangle = \langle \psi, (H - 1)\psi \rangle = (\lambda - 1)\|\psi\|^2.$$

Iterando este resultado obtenemos

$$\|(A^-)^k\psi\|^2 = \|\psi\|^2 \prod_{j=1}^k (\lambda - 2j + 1)$$

6.2. Oscilador Armónico Cuántico

para $k \in \mathbb{N}$. Si $\lambda \notin 2\mathbb{N}_0 + 1$, entonces el producto a la derecha es estrictamente negativo para valores grandes de k , lo que es imposible para $\psi \neq 0$. Por lo tanto, $\sigma(-\Delta + x^2)$ está contenido en el conjunto $2\mathbb{N}_0 + 1$.

Si ψ_0 satisface la ecuación de autovalores para $\lambda_0 = 1$, entonces $A^-\psi_0 = 0$ por la relación anterior. Así, ψ_0 satisface

$$\frac{d}{dx}\psi_0 = x\psi_0,$$

que tiene la solución normalizada en L^2 ,

$$\psi_0(x) := \pi^{-\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2}},$$

única salvo por una constante multiplicativa. La unicidad demuestra que $\lambda_0 = 1$ es un autovalor simple.

Por el Lema anterior, $(A^+)^k\psi_0$ es una autofunción para $\lambda_k := 2k + 1$, y su normalización se puede calcular usando la relación anterior,

$$\|(A^+)^k\psi_0\|^2 = \prod_{l=0}^{k-1} (\lambda_l + 1) = 2^k k!.$$

Normalizar $(A^+)^k\psi_0$ nos da la autofunción ψ_k como se muestra arriba. Para verificar que los autovalores más altos también son simples, observamos que si ψ es una autofunción con autovalor λ_k , entonces $(A^-)^k\psi$ tiene autovalor 1. Dado que λ_0 era simple, esto implica que $(A^-)^k\psi$ es un múltiplo constante de ψ_0 , y se sigue que ψ es proporcional a ψ_k .

El espectro de $-\Delta + \omega^2 x^2$ en $L^2(\mathbb{R})$ se deriva del Corolario anterior mediante un argumento de escalamiento. Consideremos la transformación unitaria de $L^2(\mathbb{R})$ definida por

$$U_\omega f(x) := \omega^{\frac{1}{4}} f\left(\omega^{\frac{1}{2}} x\right).$$

Al conjugar el operador H por U_ω obtenemos

$$U_\omega(-\Delta + x^2)U_\omega^{-1} = -\omega^{-1}\Delta + \omega x^2,$$

de modo que

$$-\Delta + \omega^2 x^2 = \omega U_\omega(-\Delta + x^2)U_\omega^{-1}.$$

Por lo tanto, por el Corolario anterior,

$$\sigma(-\Delta + \omega^2 x^2) = (2\mathbb{N}_0 + 1)\omega.$$

El teorema ahora se sigue de la diagonalización y la separación de variables. ■

Este desarrollo muestra cómo, bajo condiciones específicas, se puede caracterizar completamente el espectro de un oscilador armónico cuántico. Las técnicas utilizadas aquí, como los operadores de ascenso y descenso, son fundamentales en el estudio de sistemas cuánticos.

Algunas funciones propias de H se ilustran en la Figura 6.1. Cada función propia consiste en un factor polinomial multiplicado por $e^{-x^2/2}$. Estos factores, hasta una constante de normalización, se denominan polinomios de Hermite.

6. Operadores de Schrödinger

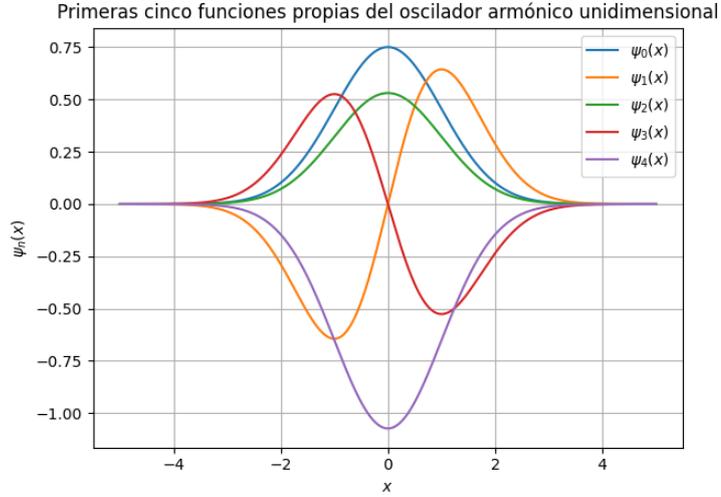


Figura 6.1: Las primeras cinco funciones propias del oscilador armónico unidimensional.

El espectro de $-\Delta + \omega^2 x^2$ en $L^2(\mathbb{R})$ se deriva del Corolario anterior mediante un argumento de escalamiento. Consideremos la transformación unitaria de $L^2(\mathbb{R})$ definida por

$$U_\omega f(x) := \omega^{\frac{1}{4}} f\left(\omega^{\frac{1}{2}} x\right).$$

Al conjugar el operador H por U_ω obtenemos

$$U_\omega(-\Delta + x^2)U_\omega^{-1} = -\omega^{-1}\Delta + \omega x^2,$$

de modo que

$$-\Delta + \omega^2 x^2 = \omega U_\omega(-\Delta + x^2)U_\omega^{-1}.$$

Por lo tanto, por el corolario anterior,

$$\sigma(-\Delta + \omega^2 x^2) = (2\mathbb{N}_0 + 1)\omega.$$

Esta derivación confirma que el espectro del oscilador armónico cuántico, bajo la acción del potencial $\omega^2 x^2$, puede obtenerse mediante un argumento de escalamiento y usando los resultados obtenidos previamente.

6.3. Perturbaciones Relativamente Acotadas

Los métodos de la Sección anterior no son aplicables a potenciales que describen interacciones electromagnéticas entre partículas, debido a que el potencial de Coulomb no está semi-acotado inferiormente. En esta sección, desarrollaremos un método general que establece la autoadjuntividad en casos como el potencial de Coulomb, considerando el término del potencial como una perturbación relativamente pequeña de $-\Delta$.

Para precisar esta noción, decimos que un operador simétrico B es relativamente acotado con respecto a un operador autoadjunto A si $\mathcal{D}(A) \subset$

6.3. Perturbaciones Relativamente Acotadas

$\mathcal{D}(B)$ y existen constantes $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ tales que

$$\|Bu\| \leq \alpha\|Au\| + \beta\|u\|$$

para todo $u \in \mathcal{D}(A)$. El siguiente resultado fue probado por Franz Rellich en 1939, y sus aplicaciones a operadores de Schrödinger en particular fueron desarrolladas por Tosio Kato.

Teorema 6.3.1. Teorema de Kato-Rellich

Sea A un operador autoadjunto en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Si B es un operador simétrico que es relativamente acotado con respecto a A , con constante $\alpha < 1$, entonces $A+B$ es autoadjunto en $\mathcal{D}(A)$ y esencialmente autoadjunto en cualquier núcleo para A .

Demostración. Nuestro objetivo es aplicar el Teorema 3.29 estableciendo la sobreyectividad de $A + B - i\sigma$ para $\sigma \in \mathbb{R}$ con $|\sigma|$ grande. Dado que A es autoadjunto, $A - i\sigma$ es invertible para $\sigma \neq 0$. Por la suposición de que $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(B)$, podemos entonces escribir

$$A + B - i\sigma = [I + B(A - i\sigma)^{-1}] (A - i\sigma),$$

y argumentar para la sobreyectividad estimando $B(A - i\sigma)^{-1}$.

Para $u \in \mathcal{D}(A)$, la suposición nos da

$$\|B(A - i\sigma)^{-1}u\| \leq \alpha\|A(A - i\sigma)^{-1}u\| + \beta\|(A - i\sigma)^{-1}u\|.$$

El teorema espectral proporciona las estimaciones

$$\|A(A - i\sigma)^{-1}\| \leq 1, \quad \|(A - i\sigma)^{-1}\| \leq |\sigma|^{-1}.$$

Por lo tanto, esto implica que $B(A - i\sigma)^{-1}$ es un operador acotado con

$$\|B(A - i\sigma)^{-1}\| \leq \alpha + \beta|\sigma|^{-1}.$$

Por hipótesis $\alpha < 1$, así que tomando $|\sigma|$ suficientemente grande, podemos asumir que

$$\|B(A - i\sigma)^{-1}\| < 1.$$

Esto garantiza que $I + B(A - i\sigma)^{-1}$ es invertible mediante series de Neumann. De esto se deduce de la relación anterior que $A + B \pm i\sigma$ es sobreyectivo como aplicación de $\mathcal{D}(A)$ a \mathcal{H} , siempre que $|\sigma|$ sea suficientemente grande. Por lo tanto, por el Teorema 3.29, $A + B$ es autoadjunto en $\mathcal{D}(A)$.

Ahora suponemos que A es meramente esencialmente autoadjunto. Si $u \in \mathcal{D}(\bar{A})$, entonces existe una secuencia $u_n \rightarrow u$ tal que Au_n converge a $\bar{A}u$. Por la suposición, la secuencia Bu_n también converge, por lo que $u \in \mathcal{D}(B)$ (ya que B es cerrado). Por continuidad, podemos extender la relación a

$$\|\bar{B}u\| \leq \alpha\|\bar{A}u\| + \beta\|u\|$$

para todo $u \in \mathcal{D}(\bar{A})$. Por la primera parte de la demostración, esto implica que $\bar{A} + B$ es autoadjunto en el dominio $\mathcal{D}(\bar{A})$.

6. Operadores de Schrödinger

Usando el hecho de que $(A + B)u_n \rightarrow \bar{A}u + Bu$, también podemos concluir que $u \in \mathcal{D}(\overline{(A + B)})$, con

$$\overline{(A + B)}u = \bar{A}u + Bu.$$

Esto significa que

$$\overline{(A + B)} \subset \bar{A} + B.$$

Ya que $\bar{A} + B$ es autoadjunto, es cerrado en particular. Por lo tanto, dado que $\bar{A} + B$ es una extensión cerrada de $A + B$ y $\overline{(A + B)}$ es la extensión cerrada más pequeña, tenemos

$$\bar{A} + B \subset \overline{(A + B)}.$$

Concluimos que $\overline{(A + B)} = \bar{A} + B$, lo cual es autoadjunto. Así, $A + B$ es esencialmente autoadjunto. ■

La aplicación original de Kato del Teorema a operadores de Schrödinger incluye el siguiente resultado, que cubre el caso del potencial de Coulomb en particular.

Teorema 6.3.2. Schrödinger con Potencial de Coulomb

Sea $n \leq 3$ y supongamos que V es un potencial real en $L^2(\mathbb{R}^n) + L^\infty(\mathbb{R}^n)$. Entonces $-\Delta + V$ es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ y autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^n)$.



Demostración. La componente $L^\infty(\mathbb{R}^n)$ se incluye para aplicaciones, pero no afecta a la prueba porque contribuye con un operador autoadjunto acotado. Por lo tanto, basta con considerar $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$.

Supongamos que $u \in H^2(\mathbb{R}^n)$. Por la inclusión de Sobolev, esto implica que u es continuo y acotado para $n < 4$. Esto da $Vu \in L^2(\mathbb{R}^n)$. Dado que esta es la condición definitoria para el dominio del operador de multiplicación M_V , concluimos que

$$H^2(\mathbb{R}^n) \subset \mathcal{D}(M_V).$$

Como en la prueba de la inclusión de Sobolev, podemos usar el hecho de que

$$\|u\|_\infty \leq (2\pi)^{-\frac{n}{2}} \|\hat{u}\|_1,$$

junto con la desigualdad de Cauchy-Schwarz, para estimar

$$\|u\|_\infty^2 \leq C \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(|\xi|^2 + b^2)^2} d^n \xi \cdot \int_{\mathbb{R}^n} (|\xi|^2 + b^2)^2 |\hat{u}(\xi)|^2 d^n \xi,$$

para $b > 0$. El primer integral da

$$\int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{(|\xi|^2 + b^2)^2} d^n \xi = Cb^{n-4},$$

donde C depende solo de n , mientras que el segundo es igual a $\|(-\Delta + b^2)u\|^2$. Por lo tanto, esto da la estimación

$$\|u\|_\infty \leq Cb^{n-4} \|(-\Delta + b^2)u\|.$$

6.3. Perturbaciones Relativamente Acotadas

Para $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y $u \in H^2(\mathbb{R}^n)$, aplicamos esta relación para obtener

$$\|Vu\| \leq \|V\| \|u\|_\infty = Cb^{n-4} \|V\| (\|\Delta u\| + b^2 \|u\|),$$

para todo $b > 0$. Tomando b suficientemente grande da

$$\|Vu\| \leq \alpha \|\Delta u\| + \beta \|u\|,$$

con α arbitrariamente pequeño. Por lo tanto, $-\Delta + V$ satisface las hipótesis del Teorema de Kato-Rellich. Para $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ y $u \in H^2(\mathbb{R}^n)$, aplicamos esta relación para obtener

$$\|Vu\| \leq \|V\| \|u\|_\infty = Cb^{n-4} \|V\| (\|\Delta u\| + b^2 \|u\|),$$

para todo $b > 0$. Tomando b suficientemente grande da

$$\|Vu\| \leq \alpha \|\Delta u\| + \beta \|u\|,$$

con α arbitrariamente pequeño. Esto muestra que el operador definido por el potencial V es relativamente acotado con respecto al operador $-\Delta$ con un $\alpha < 1$.

Por lo tanto, por el Teorema de Kato-Rellich (Teorema ??), $-\Delta + V$ es autoadjunto en $\mathcal{D}(-\Delta) = H^2(\mathbb{R}^n)$ y esencialmente autoadjunto en cualquier núcleo para $-\Delta$, que incluye $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$. Por lo tanto, el operador $-\Delta + V$ es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ y autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^n)$, como se quería demostrar. ■

Continuamos con ejemplos que ilustran la aplicabilidad del Teorema de Kato-Rellich a operadores de Schrödinger.

Ejemplo 6.3.1. Hamiltoniano del Átomo de Hidrógeno

En \mathbb{R}^3 , consideremos el operador Hamiltoniano para el átomo de hidrógeno $H := -\Delta - r^{-1}$. El potencial $V(x) = -r^{-1}$ está en $L_{\text{loc}}^2(\mathbb{R}^3)$ y es acotado fuera de un conjunto compacto. Por lo tanto, H es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ y autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^3)$, de acuerdo con el Teorema ??.

◇

Ejemplo 6.3.2. Operador de Schrödinger Magnético

Para una partícula cargada en un campo magnético, el Hamiltoniano cuántico asociado con el potencial vector magnético $A : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ es

$$H = (i\nabla + A)^2,$$

donde se omiten las constantes físicas. Un operador de este tipo se denomina operador de Schrödinger magnético. Para $f, g \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, tenemos

$$\langle f, Hg \rangle = \langle (i\nabla + A)f, (i\nabla + A)g \rangle,$$

lo que muestra que H es simétrico como operador en $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. Expandiendo el cuadrado, obtenemos

$$H = -\Delta + 2iA \cdot \nabla + (\nabla \cdot A) + A^2.$$

6. Operadores de Schrödinger

Los términos escalares $(\nabla \cdot A)$ y A^2 son acotados, siempre que asumamos que A y $\nabla \cdot A$ están en $L^\infty(\mathbb{R}^3)$, (donde la divergencia se define en el sentido débil). Sin embargo, el término del gradiente $2iA \cdot \nabla$ es un operador no acotado.

Para aplicar el Teorema de Kato-Rellich, note que para $f \in H^2(\mathbb{R}^3)$,

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} (1 + |\xi|^4) |\hat{f}(\xi)|^2 d^n \xi \\ &= \frac{1}{2} (\|f\|^2 + \|\Delta f\|^2). \end{aligned}$$

Para $A \in L^\infty(\mathbb{R}^3)$, se sigue que $2iA \cdot \nabla$ es relativamente acotado con respecto a $-\Delta$. Por lo tanto, H es autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^3)$ y esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$. ◇

Estos ejemplos demuestran cómo se pueden tratar potenciales que no están semi-acotados inferiormente mediante el enfoque de perturbaciones relativamente acotadas. Esto amplía significativamente el alcance de los operadores que se pueden considerar en la teoría de operadores de Schrödinger, abriendo la puerta a una variedad de aplicaciones físicamente relevantes.

6.4. Perturbaciones Relativamente Compactas

En esta sección, abordamos la cuestión de ubicar el espectro esencial de $-\Delta + V$. Lamentablemente, el resultado de estabilidad de Weyl, que dice que el espectro esencial no se ve afectado por perturbaciones compactas, no es útil para operadores de Schrödinger. El operador de multiplicación M_V no es compacto en $L^2(\mathbb{R}^n)$ a menos que V se anule casi en todas partes.

Nuestro primer objetivo, por lo tanto, es fortalecer el resultado de estabilidad de Weyl. En lugar de requerir que la diferencia en operadores sea compacta, impondremos esta condición en la diferencia de las resolventes.

Teorema 6.4.1. Estabilidad del Espectro Esencial

Supongamos que A y B son operadores autoadjuntos en un espacio de Hilbert \mathcal{H} . Si existe $z \in \rho(A) \cap \rho(B)$ tal que $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ es compacto, entonces $\sigma_{\text{ess}}(A) = \sigma_{\text{ess}}(B)$. ♡

Demostración. Supongamos que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(A)$. Existe una secuencia $\{u_k\} \subset \mathcal{D}(A)$ con $\|u_k\| = 1$ y $u_k \rightarrow 0$ en el sentido débil, tal que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} (A - \lambda)u_k = 0.$$

Por la definición de la resolvente,

$$(A - z)^{-1}(A - \lambda) = I - (z - \lambda)(A - z)^{-1},$$

así que esto implica que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u_k - (z - \lambda)(A - z)^{-1}u_k\| = 0.$$

6.4. Perturbaciones Relativamente Compactas

La suposición de que $(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}$ es compacta implica que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} [(A - z)^{-1} - (B - z)^{-1}] u_k = 0,$$

por lo que podemos deducir de lo anterior que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u_k - (z - \lambda)(B - z)^{-1}u_k\| = 0.$$

Si ahora definimos

$$w_k := (B - z)^{-1}u_k,$$

entonces esto se traduce en

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|(B - \lambda)w_k\| = 0.$$

Al escribir esto en la forma

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u_k - (z - \lambda)w_k\|$$

y usando el hecho de que $\|u_k\| = 1$, también podemos deducir que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|w_k\| = |z - \lambda|^{-1},$$

por lo anterior.

Supongamos que $\lambda \neq \sigma_{\text{ess}}(B)$. Si Π denota la resolución espectral de B , entonces esto significa que $\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}$ tiene rango finito para algún $\varepsilon > 0$. En particular, $\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}(B - z)^{-1}$ será compacto, de modo que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} w_k = 0.$$

Con $Q_\varepsilon := I - \Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)}$, podemos estimar

$$\begin{aligned} \|(B - \lambda)w_k\| &= \|(B - \lambda)(\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} w_k + Q_\varepsilon w_k)\| \\ &\geq \|(B - \lambda)Q_\varepsilon w_k\| - \|(B - \lambda)\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} w_k\| \\ &\geq \varepsilon \|Q_\varepsilon w_k\| - \varepsilon \|\Pi_{(\lambda-\varepsilon, \lambda+\varepsilon)} w_k\|. \end{aligned}$$

Tomando $k \rightarrow \infty$, usando lo anterior y el hecho de que $\lim_{k \rightarrow \infty} \|w_k\| = |z - \lambda|^{-1}$, obtenemos

$$\liminf_{k \rightarrow \infty} \|(B - \lambda)w_k\| \geq \varepsilon |z - \lambda|.$$

Esto contradice lo anterior, por lo que concluimos que $\lambda \in \sigma_{\text{ess}}(B)$.

Hemos demostrado que $\sigma_{\text{ess}}(A) \subset \sigma_{\text{ess}}(B)$, y el mismo argumento se aplica intercambiando A y B . ■

Este teorema proporciona una herramienta valiosa para el análisis del espectro esencial de operadores autoadjuntos, especialmente en el contexto de operadores de Schrödinger, donde las perturbaciones del operador de Laplace pueden no ser compactas pero pueden ser tratadas en términos de las diferencias de sus resolventes.

6. Operadores de Schrödinger

En muchas aplicaciones de operadores, incluidos los operadores de Schrödinger, solo se conoce explícitamente una de las resolventes. Es por ello útil invocar la segunda identidad de la resolvente, que establece que

$$(B - z)^{-1} - (A - z)^{-1} = (B - z)^{-1}(B - A)(A - z)^{-1}.$$

Para satisfacer la hipótesis de un teorema relevante sobre estabilidad, es suficiente verificar la compacidad de $(B - A)(A - z)^{-1}$.

Con esto en mente, decimos que un operador T es *relativamente compacto* con respecto a A si $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(T)$ y $T(A - z)^{-1}$ es compacto para algún $z \in \rho(A)$. Por la primera identidad de la resolvente, si $T(A - z)^{-1}$ es compacto para un valor de z , entonces es compacto para todos $z \in \rho(A)$.

Teorema 6.4.2. Estabilidad Mejorada de Weyl

Si A y T son operadores autoadjuntos y T es relativamente compacto con respecto a A , entonces $A + T$ es autoadjunto en $\mathcal{D}(A)$ y

$$\sigma_{\text{ess}}(A + T) = \sigma_{\text{ess}}(A).$$



Demostración. Primero consideramos la autoadjunción de $A + T$. Nuestro plan es demostrar que $\|T(A + i\sigma)^{-1}\|$ es pequeño para σ grande, y luego argumentar como en la prueba de un teorema relevante sobre autoadjunción.

A través del cálculo funcional, el operador $(A + i)(A - i\sigma)^{-1}$ corresponde a la multiplicación por la función

$$f_{\sigma}(x) := \frac{x + i}{x - i\sigma},$$

para $x \in \mathbb{R}$. Observe que $|f_{\sigma}(x)| \leq 1$ y $f_{\sigma} \rightarrow 0$ puntualmente cuando $\sigma \rightarrow \infty$. Por lo tanto, usando la convergencia dominada, tenemos

$$(A + i)(A - i\sigma)^{-1} \rightarrow 0$$

en el sentido fuerte del operador cuando $\sigma \rightarrow \infty$. Ahora podemos escribir

$$T(A + i\sigma)^{-1} = T(A - i)^{-1}(A - i)(A + i\sigma)^{-1}.$$

Dado que $T(A - i)^{-1}$ es compacto por suposición, y la convergencia fuerte nos da

$$[(A - i)(A + i\sigma)^{-1}]^* \rightarrow 0,$$

se sigue que

$$\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \|T(A + i\sigma)^{-1}\| = 0$$

por el resultado de un ejercicio relevante. Al elegir $|\sigma|$ suficientemente grande, podemos asegurar que

$$\|T(A + i\sigma)^{-1}\| < 1.$$

Como en la prueba de un teorema relevante sobre autoadjunción, esto implica que $A + T \pm i\sigma$ es sobreyectivo, y por lo tanto, $A + T$ es autoadjunto en $\mathcal{D}(A)$.

El hecho de que A y $A + T$ tengan los mismos espectros esenciales se sigue inmediatamente de un teorema relevante, por la identidad de la resolvente. ■

6.4. Perturbaciones Relativamente Compactas

Supongamos que $-\Delta + V$ es autoadjunto en un dominio que incluye $H^1(\mathbb{R}^n)$, como es el caso de los potenciales considerados en secciones previas. Entonces, para $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$, el teorema de Rellich implica que $\chi(-\Delta + V)^{-1}$ es compacto en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Esta observación nos lleva al siguiente corolario:

Corolario 6.4.1. Estabilidad del Espectro Esencial para Potenciales con Soporte Compacto

Supongamos que V es un potencial tal que $-\Delta + V$ es autoadjunto en un dominio que incluye $H^1(\mathbb{R}^n)$. Si $W \in L^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$ y tiene soporte compacto, entonces

$$\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = \sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V + W).$$



Consideremos, por ejemplo, el operador de Schrödinger $H := -\Delta + V$ en \mathbb{R} con el potencial de pozo cuadrado negativo:

$$V(x) = \begin{cases} -c, & |x| \leq a, \\ 0, & |x| > a, \end{cases}$$

donde a, c son constantes positivas. Por un teorema relevante sobre operadores autoadjuntos, H es autoadjunto con dominio $H^2(\mathbb{R})$. Dado que V tiene soporte compacto, el corolario anterior muestra que el espectro esencial es $[0, \infty)$.

Para encontrar el espectro discreto, notamos que para $\lambda \geq 0$ no hay soluciones L^2 de la ecuación de valores propios para $|x| > a$, por lo que todos los autovalores son negativos. Claramente $-\Delta + c \geq 0$, entonces el espectro está acotado inferiormente por $-c$. Dado que el potencial es simétrico, podemos asumir que todas las autofunciones tienen simetría par o impar. Primero consideremos las autofunciones pares para $\lambda = -\sigma^2$ con $0 < \sigma < \sqrt{c}$. Para $|x| > a$, el requerimiento L^2 implica que las autofunciones toman la forma $\psi(x) = e^{-\sigma|x|}$. En $[-a, a]$, una solución par es un múltiplo constante de $\cos(\omega x)$, donde $\omega := \sqrt{c - \sigma^2}$. Dado que las funciones en $H^2(\mathbb{R})$ son particularmente C^1 , las primeras derivadas coincidirán en $x = \pm a$. Las condiciones de coincidencia en $x = \pm a$ se reducen a

$$\sigma = \omega \tan(\omega a).$$

Debido a que $\omega \tan(\omega a)$ es decreciente como función de σ , e igual a cero en $\sigma = \sqrt{c}$, existe al menos un punto de intersección para $0 < \sigma < \sqrt{c}$. Por lo tanto, existe al menos una autofunción par para todos $c > 0$, y H tiene al menos un autovalor negativo. Hay múltiples autofunciones pares si $c > (\pi/a)^2$.

Para las autofunciones impares, la condición de coincidencia es

$$\sigma = -\omega \cot(\omega a).$$

Por lo tanto, una autofunción impar existe si y solo si $c > (\pi/2a)^2$.

Las autofunciones se concentran en el soporte de V , como se ilustra en la Figura.

Lema 6.4.1. Compacidad Relativa de M_V con Respecto a $-\Delta$

Sea $V \in L^2(\mathbb{R}^n)$ con $n \leq 3$, entonces M_V es relativamente compacto con respecto a $-\Delta$, y por lo tanto, tenemos que

$$\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty).$$



6. Operadores de Schrödinger

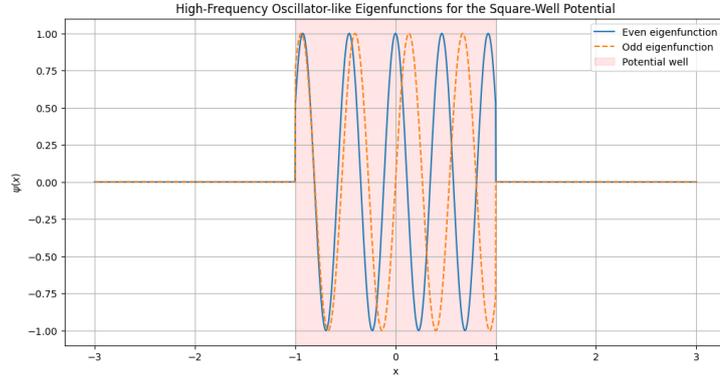


Figura 6.2: Ejemplo de autofunción para el potencial de pozo cuadrado soportado en $[-a, a]$.

Demostración. La computación del resolvente para \mathbb{R}^n nos da el núcleo integral $(-\Delta + 1)^{-1}$ como

$$G_n(r) := (2\pi)^{-\frac{n}{2}} r^{1-\frac{n}{2}} K_{\frac{n}{2}-1}(r),$$

donde $r = |x|$. De la asintótica de Bessel estándar, tenemos

$$K_v(r) = \begin{cases} O(r - |v|), & v \neq 0, \\ O(\log r), & v = 0, \end{cases}$$

cuando $r \rightarrow 0$, y $K_y(r) = O(e^{-r})$ cuando $r \rightarrow \infty$. Esto nos da

$$G_n(r) = \begin{cases} O(r), & n = 1, \\ O(\log r), & n = 2, \\ O(r^{2-n}), & n \geq 3. \end{cases}$$

En combinación con la descomposición exponencial en el infinito, estas estimaciones implican que

$$G_n \in L^2(\mathbb{R}^n),$$

siempre que $n \leq 3$. El núcleo integral de $V(-\Delta + 1)^{-1}$ es

$$K(x, y) = V(x)G_n(|x - y|).$$

Podemos estimar

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} |K(x, y)|^2 d^n x d^n y &= \int_{\mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} |V(x)^2 G_n(|x - y|)|^2 d^n x d^n y \\ &= \|V\|^2 \|G_n\|^2 \\ &< \infty. \end{aligned}$$

Esto muestra que $V(-\Delta + 1)^{-1}$ es un operador de Hilbert-Schmidt, que es compacto.

Hemos probado la compacidad relativa, y la caracterización del espectro esencial se sigue del Teorema ??.

Teorema 6.4.3. Compacidad Relativa para Potenciales en $L^2 + L^\infty$

Sea V un potencial real en $L^2_{\text{loc}}(\mathbb{R}^n)$ para $n \leq 3$. Si $V(x) \rightarrow 0$ cuando $|x| \rightarrow \infty$, entonces M_V es relativamente compacto con respecto a $-\Delta$ y, por lo tanto,

$$\sigma_{\text{ess}}(-\Delta + V) = [0, \infty).$$



Demostración. Sea χ_n la función característica del conjunto $\{|x| \leq n\}$ para $n \in \mathbb{N}$. Puesto que

$$\|(-\Delta + 1)^{-1}\| = 1,$$

tenemos una cota de la norma del operador

$$\|(1 - \chi_n)V(-\Delta + 1)^{-1}\| \leq \sup_{|x| \geq n} V(x).$$

Por la suposición de que $V \rightarrow 0$, esto implica que

$$\chi_n V(-\Delta + 1)^{-1} \rightarrow V(-\Delta + 1)^{-1}$$

a medida que $n \rightarrow \infty$, con convergencia en la norma del operador. Dado que $\chi_n V(-\Delta + 1)^{-1}$ es compacto, se sigue que $V(-\Delta + 1)^{-1}$ es compacto. El resultado reclamado ahora se sigue del Teorema ??.

El Teorema ?? se aplica en particular al Hamiltoniano cuántico del átomo de hidrógeno. Trabajaremos el espectro de este operador explícitamente en la siguiente sección. Hay resultados análogos al Teorema ?? en dimensiones más altas, pero las demostraciones son más complicadas. En dimensiones mayores a tres no tenemos la conveniencia de explotar la propiedad de Hilbert-Schmidt para probar la compacidad. ■

6.5. Átomo de Hidrógeno

Disponemos ahora de todas las herramientas necesarias para analizar el espectro del Hamiltoniano cuántico para el átomo de hidrógeno,

$$H = -\Delta - \frac{1}{r},$$

actuando en $L^2(\mathbb{R}^3)$. Por resultados previos, sabemos que H es esencialmente autoadjunto en $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ y autoadjunto en $H^2(\mathbb{R}^3)$. Además, se muestra que

$$\sigma_{\text{ess}}(H) = [0, \infty).$$

Este rango continuo de energías positivas corresponde a los estados ionizados del átomo, donde el electrón se ha liberado del núcleo.

En esta sección, demostraremos que el espectro discreto de H consiste en una secuencia de autovalores negativos que se acumulan en cero. Estos son los "estados ligados" del átomo, para los cuales el electrón está efectivamente atrapado dentro de alguna vecindad del núcleo. Las líneas de absorción y emisión del hidrógeno atómico corresponden a la diferencia de energía entre dos estados ligados. Un átomo solo puede absorber o emitir fotones en estas frecuencias específicas.

6. Operadores de Schrödinger

Teorema 6.5.1. Espectro Discreto del Operador de Hidrógeno

El operador de hidrógeno tiene un espectro discreto que consiste en autovalores negativos,

$$\lambda_n = -\frac{1}{4n^2},$$

para $n \in \mathbb{N}$, cada uno con multiplicidad n^2 .



Demostración. Por análisis previo, el espectro discreto es negativo. Supongamos que $\lambda < 0$ es un autovalor, y sea $W_\lambda \subset H^2(\mathbb{R}^3)$ el subespacio de autovalores correspondiente, que es de dimensión finita. En coordenadas esféricas (r, φ, θ) , el Laplaciano toma la forma

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2 \sin \varphi} \partial_\varphi (\sin \varphi \partial_\varphi) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \varphi} \partial_\theta^2.$$

Note que las variables angulares se pueden separar definiendo un Laplaciano esférico

$$\Delta_{\mathbb{S}^2} := \frac{1}{\sin \varphi} \partial_\varphi (\sin \varphi \partial_\varphi) + \frac{1}{\sin^2 \varphi} \partial_\theta^2.$$

Aquí, \mathbb{S}^2 denota la esfera unitaria en \mathbb{R}^3 . De la relación,

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) + \frac{1}{r^2} \Delta_{\mathbb{S}^2},$$

es evidente que Δ y $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ conmutan como operadores diferenciales. La acción de $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ sobre W_λ está bien definida. De hecho, un análisis de regularidad local, similar al empleado en demostraciones previas, se puede utilizar para mostrar que las funciones propias de H son suaves excepto posiblemente en el origen. Dado que $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ conmuta con Δ , mapea W_λ a sí mismo. Además, utilizando integración por partes en coordenadas esféricas, podemos verificar fácilmente que $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ es un operador positivo en el dominio $H^2(\mathbb{R}^3)$. Por lo tanto, la restricción de $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ a W_λ es autoadjunta, ya que este espacio es de dimensión finita.

El mismo razonamiento se aplica al operador $-i\partial_\theta$, que conmuta tanto con Δ como con $\Delta_{\mathbb{S}^2}$ y se restringe a un operador autoadjunto en W_λ . (Un físico interpretaría $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$ y $-i\partial_\theta$ como observables cuánticos en términos de momento angular. El cuadrado del momento angular total está representado por $-\Delta_{\mathbb{S}^2}$, mientras que $-i\partial_\theta$ da la componente del momento angular sobre el eje z .)

Por el teorema espectral en su forma de dimensión finita, W_λ admite una base que consiste en funciones propias simultáneas de $-\partial_\theta$ y $\Delta_{\mathbb{S}^2}$. Supongamos que u es una función propia conjunta. Dado que se requiere que u sea suave lejos del origen, es evidente por el hecho de que u es una función propia periódica de $-i\partial_\theta$ que u tiene la forma

$$u(r, \varphi, \theta) = e^{im\theta} f(r, \varphi),$$

para $m \in \mathbb{Z}$ y alguna función f en $[0, \infty) \times [0, \pi]$. Supongamos ahora que

$$-\Delta_{\mathbb{S}^2} u = \kappa u$$

para $\kappa > 0$. Tras hacer las sustituciones $u = e^{im\theta} f$ y $z = \cos \varphi$, esta ecuación de autovalores se convierte en

$$(1 - z^2) f'' - 2zf' + \left(\kappa - \frac{m^2}{1 - z^2} \right) f = 0.$$

Esta es la ecuación de Legendre; un par de soluciones linealmente independientes está dado por las funciones de Legendre $P_l^m(z)$ y $Q_l^m(z)$, donde $\kappa = l(l + 1)$.

Para un elemento de W_λ requerimos que $e^{im\theta} f(r, \varphi)$ sea suave lejos del origen. Dado que la coordenada θ es singular en el eje z , representado por $z = \pm 1$, necesitamos que las soluciones de Legendre sean regulares en estos puntos. La solución $Q_l^m(z)$ diverge cuando $z \rightarrow 1$ para todas las elecciones de parámetro, por lo que se descarta. La solución $P_l^m(z)$ es regular en $z = 1$, pero diverge cuando $z \rightarrow -1$, excepto en el caso especial donde $l \in \mathbb{N}_0$ con $|m| \leq l$. Asumiendo que l, m cumplen con estas condiciones, la fórmula de Rodrigues nos da

$$P_l^m(z) = \frac{(-1)^m}{2^l l!} (1 - z^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dz^{l+m}} (z^2 - 1)^l.$$

De esta expresión es fácil verificar que $P_l^m(\cos \varphi)$ es un polinomio en $\sin \varphi$ y $\cos \varphi$. Con estas consideraciones, hemos restringido las opciones para u a la forma

$$u(r, \varphi, \theta) = e^{im\theta} P_l^m(\cos \varphi) h(r),$$

para $l \in \mathbb{N}_0, m \in \{-m, \dots, m\}$, y h una función en $[0, \infty)$. La combinación $e^{im\theta} P_l^m(\cos \varphi)$ se llama armónico esférico, y se denota tradicionalmente por $Y_l^m(\varphi, \theta)$, hasta una constante de normalización.

Ahora nos volcamos a la ecuación radial. Dado que implica que $-\Delta_{\mathbb{S}^2} u = l(l + 1)u$, la ecuación de autovalores completa $Hu = \lambda u$ se reduce a la forma radial

$$\left[-\frac{1}{r^2} \partial_r (r^2 \partial_r) - \frac{1}{r} + \frac{l(l + 1)}{r^2} \right] h = \lambda h.$$

La multiplicación por r^2 nos lleva a una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden con coeficientes polinomiales,

$$h'' + 2rh' + (r + \lambda r^2 - l(l + 1)) h = 0,$$

a la que se puede aplicar el método de Frobenius de series de potencias. Las raíces indiciales son l y $-l - 1$. Dado que estas difieren en un entero, el teorema de Fuchs (ver, por ejemplo, [Fuente]) nos da dos soluciones linealmente independientes de la forma,

$$h_1(r) = r^l f_1(r), \quad h_2(r) = r^{-l-1} f_2(r) + cr^l f_1(r) \log r,$$

donde las funciones f_j son enteras y satisfacen $f_j(0) = 1$, y c es una constante. La solución singular h_2 se puede descartar en nuestro caso, porque esto resultaría en una función u que no yace en $H^2(\mathbb{R}^3)$. Por lo tanto, el componente radial de una función propia tiene una expansión en serie de potencias con radio infinito de convergencia, comenzando desde el término r^l .

Para simplificar el cálculo de coeficientes, es útil extraer el comportamiento asintótico cuando $r \rightarrow 0$. La parte principal de en el infinito es $-h'' = \lambda h$.

6. Operadores de Schrödinger

Si establecemos $\lambda = -\sigma^2$ con $\sigma > 0$, entonces el comportamiento asintótico esperado es $e^{\pm\sigma r}$. Por supuesto, solo la solución decreciente sería compatible con una función H^2 . Por lo tanto, tomamos el ansatz

$$h(r) = q(r)r^l e^{-\sigma r},$$

y buscamos una expansión en serie de potencias de la forma

$$q(r) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k r^k.$$

Al sustituir en y comparar los coeficientes de r^{k-1} se obtiene una relación recursiva

$$a_k = \frac{2\sigma(k+l) - 1}{k(k+2l+1)} a_{k-1}.$$

La serie resultante es convergente para cualquier valor de σ . Sin embargo, para $\delta > 0$ la relación a_k/a_{k-1} está acotada por debajo por $(2-\delta)\sigma/k$ para k suficientemente grande. Esto implica un límite inferior exponencial $q(r) \geq ce^{(2-\delta)r}$, a menos que la secuencia definida por termine con algún coeficiente igual a cero. La falta de terminación implicaría que $h(r)$ crece exponencialmente cuando $r \rightarrow \infty$, lo cual está claramente descartado por el requisito de L^2 .

Por lo tanto, para que $h(r)$ sea el componente radial de una función propia, debemos tener $\sigma = 1/2n$ para algún entero $n > l$, de modo que todos los términos en la secuencia determinada por se anulen para $k \geq n-l$. Si el polinomio resultante se denota por $q_{n,l}(r)$, entonces nuestra función propia potencial tiene la forma

$$u_{n,l,m}(r, \varphi, \theta) = r^l q_{n,l}(r) Y_l^m(\varphi, \theta) e^{-r/2n},$$

Claramente $u_{n,l,m}$ decae exponencialmente cuando $r \rightarrow \infty$. Además, $r^l Y_l^m(\varphi, \theta)$ es un polinomio homogéneo de grado l en las variables x, y, z , por lo que es fácil verificar que $u_{n,l,m} \in H^2(\mathbb{R}^3)$.

El autovalor correspondiente a $u_{n,l,m}$ es $\lambda = -\sigma^2$, por lo que el espectro discreto de H está dado por

$$\sigma_{\text{disc}}(H) = \left\{ -\frac{1}{4n^2} : n \in \mathbb{N} \right\}.$$

Para cada valor de n , las posibles elecciones son $l \in \{0, \dots, n-1\}$ y $m \in \{-l, \dots, l\}$. La multiplicidad de $-1/4n^2$ es, por lo tanto,

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

Si reintroducimos las constantes físicas, como en la sección inicial, el Hamiltoniano cuántico se convierte en

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{kq^2}{r}.$$

Al escalar los autovalores del Teorema, podemos calcular los niveles de energía del átomo de hidrógeno como

$$E_n := -\frac{mq^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}.$$

Esto concuerda con la fórmula empírica para las líneas de emisión y absorción del hidrógeno atómico que fue desarrollada por Johannes Rydberg en 1888. ■

CAPÍTULO 7

Métodos Numéricos

7.1. Nodos de Chebyshev para la Discretización de Espacios Funcionales

Los nodos de Chebyshev son una herramienta esencial en el análisis numérico, particularmente útiles en la discretización de espacios funcionales para aproximaciones polinomiales y en la integración numérica. Su aplicación en el contexto de la discretización de operadores de Schrödinger es de gran relevancia para el análisis espectral detallado.

Nodos de Chebyshev

Teorema 7.1.1. Definición y Propiedades de Nodos de Chebyshev

Los nodos de Chebyshev de primer tipo en el intervalo $[-1, 1]$ son definidos por la relación

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi(2k-1)}{2n}\right), \quad k = 1, \dots, n,$$

donde n es el número total de nodos. Estos nodos se caracterizan por minimizar la máxima magnitud del polinomio de Chebyshev de primer tipo de grado n , proporcionando una distribución de puntos que es óptima en el sentido de la aproximación polinómica.



Demostración. Para demostrar la propiedad de minimización de la magnitud del polinomio de Chebyshev, consideramos el polinomio de Chebyshev de primer tipo $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$, que oscila entre -1 y 1 en el intervalo $[-1, 1]$.

Los nodos de Chebyshev x_k son las raíces de $T_n(x)$, lo que significa que $T_n(x_k) = 0$ para $k = 1, \dots, n$. Además, el polinomio $T_n(x)$ alcanza su máxima magnitud en los puntos $\cos\left(\frac{\pi j}{n}\right)$, $j = 0, \dots, n$, donde toma valores de 1 o -1 .

La propiedad clave de los nodos de Chebyshev se demuestra considerando cualquier polinomio $p(x)$ de grado menor o igual que n y observando que la diferencia $p(x) - T_n(x)$ también es un polinomio de grado menor o igual que n . Por el teorema del valor intermedio, esta diferencia tiene al menos $n + 1$ ceros en el intervalo $[-1, 1]$, contando la multiplicidad.

Si se asume que el máximo de $|p(x)|$ en $[-1, 1]$ es menor que el máximo de $|T_n(x)|$, entonces $p(x) - T_n(x)$ tendría más de n cambios de signo en $[-1, 1]$, lo

7. Métodos Numéricos

que es imposible para un polinomio de grado n . Por lo tanto, el máximo de $|p(x)|$ en $[-1, 1]$ no puede ser menor que el máximo de $|T_n(x)|$.

Los nodos de Chebyshev x_k son precisamente los puntos donde $T_n(x)$ y $-T_n(x)$ alcanzan alternativamente sus máximos y mínimos. Por lo tanto, estos nodos minimizan la máxima magnitud de $T_n(x)$ en comparación con cualquier otra elección de n puntos en el intervalo $[-1, 1]$, proporcionando una interpolación polinómica óptima en términos de la magnitud máxima del error.

Esta propiedad de minimización de la magnitud del polinomio de Chebyshev es lo que hace que los nodos de Chebyshev sean particularmente útiles para la interpolación polinómica, ya que ayuda a controlar el fenómeno de Runge y mejora la precisión de la aproximación. ■

Aplicación de Nodos de Chebyshev en el Análisis Espectral

Los nodos de Chebyshev, por su distribución óptima, son una elección preferida para la discretización del espacio en el análisis espectral de operadores de Schrödinger, permitiendo una aproximación numérica más precisa y estable de las propiedades espectrales del operador.

La utilización de nodos de Chebyshev en la discretización en el análisis espectral asegura la optimización del error de interpolación y la aproximación numérica, lo que es crucial para la resolución precisa de ecuaciones diferenciales y el cálculo detallado de autovalores y autofunciones en el contexto de operadores de Schrödinger.

7.2. Construcción de la Matriz Hamiltoniana

La matriz hamiltoniana en mecánica cuántica es una representación matricial del operador hamiltoniano, que describe la energía total de un sistema. Esta matriz es fundamental para calcular los estados de energía y las funciones de onda de un sistema cuántico en una base discreta. En esta sección, describimos el proceso de construcción de la matriz hamiltoniana para un potencial unidimensional utilizando los nodos de Chebyshev y una aproximación de diferencias finitas para el operador laplaciano.

Discretización del Espacio con Nodos de Chebyshev

La discretización del espacio se realiza utilizando nodos de Chebyshev, que minimizan los errores de interpolación y maximizan la estabilidad numérica. Los nodos de Chebyshev en el intervalo $[-L, L]$ se definen como:

$$r_k = L \cos\left(\frac{\pi(2k-1)}{2n}\right), \quad k = 1, \dots, n. \quad (7.1)$$

Estos nodos se utilizan para representar el espacio en el que se define el potencial y el operador hamiltoniano.

Aproximación del Operador Laplaciano

El operador laplaciano, que representa la energía cinética en el operador hamiltoniano, se aproxima utilizando el método de diferencias finitas. En una

7.3. El Método de Lanczos para la Diagonalización de Matrices

mallla uniforme, la segunda derivada de una función $f(r)$ en el nodo r_k se aproxima como:

$$\frac{d^2 f}{dr^2}(r_k) \approx \frac{f(r_{k-1}) - 2f(r_k) + f(r_{k+1}))}{\Delta r^2}, \quad (7.2)$$

donde Δr es el espaciado entre nodos adyacentes. Sin embargo, para los nodos de Chebyshev, Δr no es constante y la fórmula se ajusta para tener en cuenta el espaciado variable.

Construcción de la Matriz Hamiltoniana

La matriz hamiltoniana H se construye combinando las contribuciones de la energía cinética y potencial. Cada elemento H_{ij} de la matriz se calcula como:

$$H_{ij} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dr^2} \right)_{ij} + V(r_i) \delta_{ij}, \quad (7.3)$$

donde $\left(\frac{d^2}{dr^2} \right)_{ij}$ es la aproximación de la segunda derivada del operador laplaciano en los nodos discretos, y $V(r_i)$ es el potencial en el nodo r_i . La matriz resultante es una representación discreta del operador hamiltoniano en el espacio de estados.

Condiciones de Frontera

Las condiciones de frontera son cruciales para la precisión de la aproximación. Para un sistema finito, se pueden aplicar condiciones de frontera de Dirichlet, asumiendo que la función de onda se anula en los extremos del intervalo. Esto se refleja en la matriz hamiltoniana asegurando que los elementos correspondientes a los nodos en los extremos tengan valores adecuados que representen la energía potencial infinita en las fronteras.

La construcción cuidadosa de la matriz hamiltoniana es esencial para garantizar la precisión de los cálculos en mecánica cuántica computacional. Los métodos descritos aquí son fundamentales para el estudio de sistemas cuánticos discretizados y proporcionan la base para análisis más avanzados y simulaciones numéricas.

7.3. El Método de Lanczos para la Diagonalización de Matrices

El método de Lanczos es una técnica iterativa para reducir una matriz grande y dispersa a una forma tridiagonal, facilitando el cálculo de sus valores y vectores propios más significativos. En esta sección, describimos la implementación del método de Lanczos y su aplicación en el contexto de la mecánica cuántica computacional.

Fundamentos del Método de Lanczos

El método de Lanczos transforma una matriz hermitiana $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ en una matriz tridiagonal simétrica $T \in \mathbb{C}^{k \times k}$ con $k \ll n$, preservando los extremos

7. Métodos Numéricos

del espectro. La transformación se realiza mediante una secuencia de vectores ortogonales q_1, q_2, \dots, q_k conocidos como vectores de Lanczos, que se generan iterativamente.

Algoritmo del Método de Lanczos

El algoritmo del método de Lanczos se puede resumir en los siguientes pasos:

1. **Inicialización:** Seleccionar un vector inicial q_1 con $\|q_1\| = 1$. Inicializar $q_0 = 0$, $\alpha_0 = 0$ y $\beta_0 = 0$.
2. **Iteración:** Para $j = 1, 2, \dots, k$:
 - a) Aplicar la matriz A al vector q_j : $v = Aq_j$.
 - b) Calcular $\alpha_j = q_j^* v$.
 - c) Actualizar v : $v = v - \alpha_j q_j - \beta_{j-1} q_{j-1}$.
 - d) Calcular $\beta_j = \|v\|$ y normalizar v : $q_{j+1} = v/\beta_j$.
3. **Construcción de la Matriz Tridiagonal:** Construir la matriz T con los elementos α_j en la diagonal y β_j en las diagonales superiores e inferiores.

Propiedades y Aplicaciones

El método de Lanczos es particularmente eficiente para matrices dispersas, donde cada vector q_j solo interactúa con un pequeño número de otros vectores. Esta eficiencia hace del método de Lanczos una herramienta valiosa en física computacional, especialmente en el estudio de sistemas cuánticos donde la matriz hamiltoniana es grande y dispersa.

La matriz tridiagonal resultante T es más fácil de diagonalizar que la matriz original A , y sus valores propios más grandes o más pequeños (dependiendo de la implementación) son aproximaciones de los valores propios correspondientes de A . Los vectores propios de T pueden utilizarse para construir aproximaciones de los vectores propios de A .

Consideraciones Prácticas

En la implementación práctica del método de Lanczos, es crucial mantener la ortogonalidad de los vectores q_j en presencia de errores de redondeo. Además, el número de iteraciones k debe elegirse cuidadosamente para equilibrar la precisión de las aproximaciones y la complejidad computacional.

El método de Lanczos ha encontrado aplicaciones en una variedad de campos, desde la resolución de sistemas de ecuaciones lineales hasta la determinación de las propiedades fundamentales de los sistemas cuánticos. Su capacidad para manejar eficientemente matrices grandes y dispersas lo convierte en una herramienta indispensable en el arsenal de la física computacional y la ingeniería numérica.

7.3. El Método de Lanczos para la Diagonalización de Matrices

[Iac14]

Bibliografía

- [Bor20] Borthwick, D. *Spectral Theory: Basic Concepts and Applications*. Graduate Texts in Mathematics. Cham, Switzerland: Springer Nature Switzerland AG, 2020.
- [Con90] Conway, J. B. *A Course in Functional Analysis*. Springer-Verlag, 1990.
- [DS58] Dunford, N. y Schwartz, J. T. *Linear Operators, Part II: Spectral Theory*. Wiley Classics Library, 1958.
- [Gri18] Griffiths, D. J. *Introduction to Quantum Mechanics*. 3.^a ed. Cambridge University Press, 2018.
- [HSG79] Hensch, T. W., Schawlow, A. L. y George, W. «The Spectrum of Atomic Hydrogen». En: *Scientific American* vol. 240, n.º 3 (1979), págs. 94-111.
- [Iac14] Iacob, F. «Spectral characterization of hydrogen-like atoms confined by oscillating systems». En: *Central European Journal of Physics* vol. 12, n.º 9 (2014), págs. 628-636.
- [RS80] Reed, M. y Simon, B. *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*. Academic Press, 1980.
- [Rud91] Rudin, W. *Functional Analysis*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 1991.
- [TL05] Taylor, A. E. y Lay, D. C. *Introduction to Functional Analysis*. John Wiley y Sons, 2005.
- [Tre97] Trefethen, L. N. *Spectral Methods in MATLAB*. SIAM, 1997.
- [Vad23] Vadhan, S. *CS229r: Spectral Graph Theory in Computer Science*. <https://salil.seas.harvard.edu/courses/cs229r>. 2023.
- [Woy+18] Woywod, C. et al. «An efficient pseudo-spectral method for the description of atomic electronic wave functions - Application to the hydrogen atom in a uniform magnetic field». En: *Chemical Physics* vol. 515 (2018), págs. 299-314.

Índice alfabético

- Acotamiento
 - Uniforme, 15
- Adjuntos de Operadores
 - No Acotados, 32
- Análisis Espectral, 126
- Autoadjunción Esencial, 102
- Autoadjunto Esencial, 102

- Base Ortonormal, 24

- Compacidad Secuencial Débil, 27
- Convergencia
 - Débil, 24
- Cálculo Funcional
 - Continuo, 84
 - para Operadores
 - Autoadjuntos, 92

- Descomposición Espectral, 94, 96
- Diagonalización de Matrices, 127
- Diferencias Finitas, 126

- Ejemplo
 - Operador de Multiplicación, 91
- Espacio
 - L^p , 10
- Espacio de Hilbert, 15
- Espacio de Sobolev, 17
- Espacio Vectorial Normado, 8
- Espectro, 55
 - Acotación, 56
 - de operadores autoadjuntos, 72
 - Definición, 55
 - Operadores Adjoint, 57
 - Propiedades Básicas, 56
 - radio espectral, 75
- Espectro Continuo, 96

- Espectro del Oscilador Armónico
 - Cuántico, 107
- Espectro Discreto, 105
- Extensión de Forma Cuadrática, 103

- Forma Sesquilineal
 - Acotada, 23
- Formulación del Problema, 103
- Funciones Analíticas de Operadores con Valor, 65
- Función de Green
 - Laplaciano Euclidiano, 60

- Identidad del Resolvente, 70

- Matriz Hamiltoniana, 126
- Medida
 - Espectral, 86
- Método de Lanczos, 127

- Nodos de Chebyshev, 125

- Operador
 - Espacio de Hilbert, 30
 - Asociado a una Forma Sesquilineal, 23
 - Lineal Acotado, 11
 - Unitario, 84
- Operador Diferencial, 56
- Operador Hamiltoniano, 126
- Operadores
 - autoadjuntos, 75
 - de Hilbert-Schmidt, 79
 - No Acotados, 29
 - Schrödinger, 75
 - Traza, 80

Bibliografía

- Operadores de Schrödinger, 101
- Ortogonalidad
 - en Espacios de Hilbert, 21
- Oscilador Armónico Cuántico, 106
- Perturbaciones Relativamente Acotadas, 110
- Perturbaciones Relativamente Compactas, 114
- Potenciales Positivos, 102
- Principio Min-Max, 98
- Radio Espectral, 70
- Resolvente, 55
 - Definición, 55
 - Laplaciano Euclidiano, 60
 - Operadores Adjoint, 57
- Resultado Principal, 103
- Teorema
 - Autoadjunto Esencial, 102
 - Espectral para Operadores Autoadjuntos, 89
 - Espectral para Operadores Unitarios, 88
- Teorema Espectral, 83
- Teorema espectral para operadores compactos autoadjuntos, 77
- Topología
 - de Operadores, 13
- Transformada de Fourier y el Laplaciano, 31, 33
- Valores Propios y Vectores Propios, 127



ESCUELA SUPERIOR POLITÉCNICA DE CHIMBORAZO
CERTIFICADO DE CUMPLIMIENTO DE LA GUÍA PARA
NORMALIZACIÓN DE TRABAJOS DE FIN DE GRADO

Fecha de entrega: 12/06/2024

INFORMACIÓN DEL AUTOR

Nombres – Apellidos: César Daniel Reinoso Reinoso

INFORMACIÓN INSTITUCIONAL

Facultad: Ciencias

Carrera: Matemática

Título a optar: Matemático

Mcs. Ramón Antonio Abancín Ospina
Director del Trabajo de Titulación

Mcs. Carlos Eduardo Cova Salaya
Asesor del Trabajo de Titulación