Kémiai matematika
9. gyakorlat

Busai Ágota
agota.busai@gmail.com
`www.math.bme.hu/~bgotti`

2016.11.17.

1. Hogyan hat a $\widehat{P} = \dfrac{|f\rangle\langle f|}{\langle f|f\rangle}$ operátor egy $|g\rangle$ vektorra?

HF 2. Mutassuk meg, hogy a fenti $\widehat{P}$ operátor idempotens, azaz $\widehat{P}^2 = \widehat{P}$.

3. Legyen $|a\rangle = \begin{pmatrix}1 & 0 & 1\end{pmatrix}^\dagger$, $|b\rangle = \begin{pmatrix}0 & 1 & 0\end{pmatrix}^\dagger$. Írd fel a $|v\rangle = \begin{pmatrix}0 & 0 & 2\end{pmatrix}^\dagger$ vektor vetületét az $|a\rangle$ és $|b\rangle$ által meghatározott síkra!

4. Írjuk fel azt a projekciós operátort, amelyik az $y = 3x$ egyenesre vetít!
Írjuk fel az operátor mátrixát!
Mi lesz a $|v\rangle = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$ vektor egyenesre eső vetülete?

5. Mely számok lehetnek egy projekciós operátor ($\widehat{P}^2 = \widehat{P}$) sajátértékei?

6. Bizonyítsd be, hogy ha $\widehat{P}$ tetszőleges projekció, akkor $1 + \widehat{P}$ invertálható és az inverze $1 - \frac{1}{2}\widehat{P}$! (1 az egységoperátor)

7. Legyen $\{|i\rangle\}_{i=1}^n$ ONB, a $\widehat{P} = |k\rangle\langle k|$ a k-adik bázisvektorra vetítő operátor.

(a) Mik lehetnek a $\widehat{T} = \widehat{I} - 2\widehat{P}$ tükröző operátor sajátértékei? ($\widehat{I}$ az egységoperátor)

(b) Mivel egyenlő a $\widehat{T}^2$ operátor?

Definíció: f és g függvények *távolsága* L_2-ben: $d(f,g) = \|f-g\| = \sqrt{\langle f-g|f-g\rangle}$.

HF 8. Legyen $f(x) = 2x + 3x^4$, $g(x) = x^3 - 5x^2 \in L_2[0,1]$. Milyen messze van egymástól a két függvény?

9. Mennyi az $f(x) = \sqrt{\cos x}$ függvény $L_2[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$-beli normája? Mi a normált függvény $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$-n?

Kifejtés bázison: Legyen $\{|f_k\rangle\}_{k=1}^N$ véges ONB és $g = \sum_k c_k |f_k\rangle$.

Kíváncsiak vagyunk az l-edik együtthatóra, azaz c_l-re:

$$g = \sum_k c_k |f_k\rangle$$
$$\langle f_l|g\rangle = \sum_k c_k \underbrace{\langle f_l|f_k\rangle}_{\delta_{lk}} = c_l \Rightarrow c_l = \langle f_l|g\rangle\,.$$

Definíció (páros ill. páratlan függvény): $f(x)$ *páros* függvény, ha $\forall x \in \mathcal{D}_f$ esetén $f(-x) = f(x)$, és $f(x)$ *páratlan* függvény, ha $\forall x \in \mathcal{D}_f$ esetén $f(-x) = -f(x)$.

Megjegyzés: Páratlan függvény integrálja y tengelyre szimmetrikus intervallumon zérus.

Állítás: **(i)** „páros” $\cdot$„páratlan” $=$„páratlan”, ugyanis:

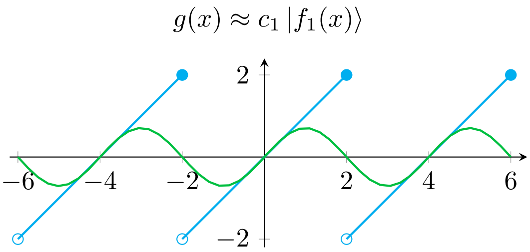
$$\left(f_{\text{ps}} \cdot f_{\text{ptln}}\right)(-x) = f_{\text{ps}}(x)(-f_{\text{ptln}}(x)) = -\left(f_{\text{ps}} \cdot f_{\text{ptln}}\right)(x)$$

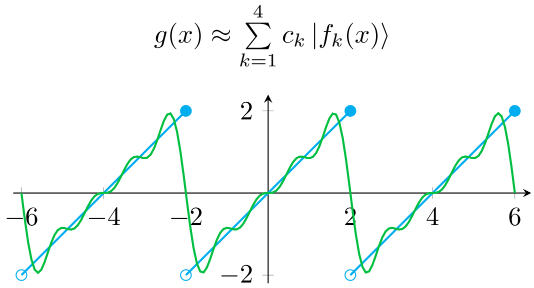
(ii) „páros” $\cdot$„páros” $=$„páros”

(iii) „páratlan” $\cdot$„páratlan” $=$„páros”

10. Legyen $g(x)$ a 4 periódusú fűrészfog függvény, azaz $g(x) = x + 4m$ ha $x \in (-2-4m, 2-4m]$, $m \in \mathbb{Z}$. Fejtsd sorba az $L_2(-2,2)$ téren a $g(x)$ függvényt az alábbi $\{f_k\}$ bázison (határozd meg $\mathcal{N}_k$-t, majd határozd meg a c_k kifejtési együtthatókat)!

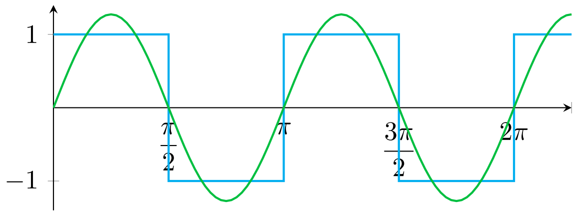
$$f_k(x) = \frac{1}{\mathcal{N}_k} \sin\left(k\frac{x}{4}2\pi\right)$$





11. Határozd meg az alábbi ábrán látható négyszögjelfüggvény Fourier-együtthatóit az $L_2(0, 2\pi)$ tér alábbi ortonormált bázisán!

$$\Phi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \quad \Phi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos x, \quad \Phi_3(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin x, \quad \Phi_4(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos 2x, \quad \Phi_5(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin 2x$$



HF♥ 12. Adott a következő függvényrendszer $L_2(0, \infty)$-en

$$f_1(x) = \mathrm{e}^{-x^2}, \quad f_2(x) = x\,\mathrm{e}^{-x^2}, \quad f_3(x) = x^2\,\mathrm{e}^{-x^2}.$$

(a) Normáljuk és ortogonalizáljuk őket!

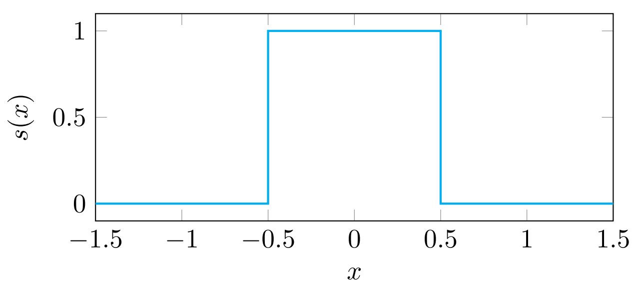
(b) Az előző pontban nyert ortogonális bázison fejtsük sorba az $f(x) = \mathrm{e}^{-x}$ függvényt!

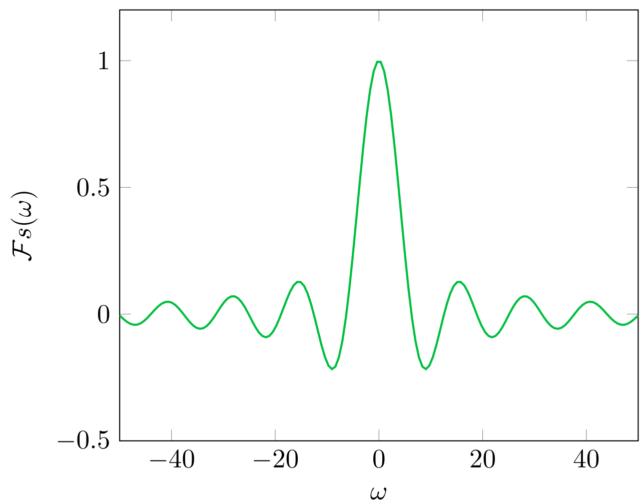
13. Milyen feltételekkel ortogonális egy $f(x)$ $L_2(-\infty, \infty)$-beli valós függvény a saját deriváltjára?

14. Határozzuk meg az

$$s(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } |x| \le \frac{1}{2} \\ 0, & \text{ha } |x| > \frac{1}{2} \end{cases}$$

négyszögimpulzus Fourier-transzformáltját!





15. Fourier-transzformáljuk az azonosan 1 függvényt!

16. Bizonyítsuk be, hogy a konvolúció Fourier-transzformáltja az alábbi módon írható fel a tényezők Fourier-transzformáltjának szorzataként!

$$\mathcal{F}(f * g)(\omega) = \sqrt{2\pi}\,\mathcal{F}f(\omega)\mathcal{F}g(\omega)$$

HF 17. Mutassuk meg, hogy az $\left\{ |f_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\imath kx}, k \in \mathbb{Z} \right\}$ ONB $L_2(-\pi, \pi)$-n!