Lineare Algebra I

Viele grundlegende Gleichungen der Physik sind linear. Nicht-lineare Gleichungen lassen sich oft über einen gewissen Bereich "linearisieren", d.h. durch ein lineares Gleichungssystem approximieren.

Betrachten wir dazu beispielhaft das folgende lineare Gleichungssystem mit N Gleichungen

$$\begin{aligned} a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \ldots + a_{1N} x_N &= b_1 \\ a_{21} x_1 + a_{22} x_2 + \ldots + a_{2N} x_N &= b_2 \\ \vdots \qquad\qquad\qquad & \vdots \\ a_{N1} x_1 + a_{N2} x_2 + \ldots + a_{NN} x_N &= b_N \end{aligned}$$

welches sich um einiges kompakter in Matrixform schreiben läßt

$$A \cdot \vec{x} = \vec{b} \quad .$$

1) Eine häufige Problemstellung ist, daß die Matrix A bekannt ist (d.h. alle Einträge a_{ij} sind gegeben) und auch der Vektor $\vec{b}$, wohingegen der Vektor $\vec{x}$ unbekannt ist, welcher das Gleichungssystem löst.

Wir haben eine derartige Situation im Rahmen des Crank-Nicolson Verfahrens kennengelernt:

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x,t) = - \varkappa \frac{\partial^2}{\partial x^2} T(x,t)$$ Wärmeleitungsgleichung

$$\downarrow$$

räumliche Temperaturverteilung zur Zeit j+1

$$M \cdot \vec{T}_{j+1} = \vec{d} \qquad \text{wobei } \vec{d} = \tilde{M} \vec{T}_j$$ Crank-Nicolson Verfahren

2) Eine zweite häufige Problemstellung ist die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren einer gegebenen Matrix A, d.h.

$$A \cdot \vec{x}_i = b_i \, \vec{x}_i$$

$\vec{x}_i$: i-ter Eigenvektor, b_i: i-ter Eigenwert

Artverwandte Probleme sind die Berechnung der Determinanten einer Matrix oder des Inversen einer Matrix, d.h. $A \cdot A^{-1} = \mathbb{1}$.

3) Matrix-Zerlegungen, Singulärwertzerlegung $A = USV^{+}$

Wir wollen uns in dieser Vorlesung in erster Linie der ersten Problemstellung (Berechnung des unbekannten Vektors $\vec{x}$ in $A\vec{x} = \vec{b}$) widmen. Fokus der kommenden Vorlesung wird dann die Berechnung der Eigenwerte und -vektoren einer gegeben Matrix $\vec{A}$ sein.

Gauß-Elimination

Die Gauß-Elimination ist ein iteratives Verfahren zur Berechnung des unbekannten Vektors $\vec{x}$ in $A\vec{x} = \vec{b}$.

Betrachten wir zunächst ein einfaches Beispiel:

$N = 2$:

$$\mathrm{I}: \quad x_1 + x_2 = 1$$
$$\mathrm{II}: \quad 2x_1 - 2x_2 = 3$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -2 \end{pmatrix}, \quad \vec{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow A\vec{x} = \vec{b}$$

Schritt 1: Bilde $\mathrm{II}^{(1)} = \mathrm{II} - 2 \cdot \mathrm{I}$

$$\mathrm{I}: \quad x_1 + x_2 = 1$$
$$\mathrm{II}^{(1)}: \quad -4x_2 = 1$$

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -4 \end{pmatrix}, \quad \vec{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow A^{(1)} \vec{x} = \vec{b}^{(1)}$$

Schritt 2: Aus $\mathrm{II}^{(1)}$ folgt $x_2 = -\frac{1}{4}$

Einsetzen in I: $x_1 - \frac{1}{4} = 1 \Rightarrow x_1 = \frac{5}{4}$

$$\left.\begin{array}{l} x_2 = -\frac{1}{4} \\ x_1 = \frac{5}{4} \end{array}\right\} \rightarrow \vec{x} = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 5 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Dieses Verfahren wollen wir nun auf ein beliebiges lineares Gleichungssystem mit N Gleichungen verallgemeinern.

Ziel des ersten Schrittes soll es dabei sein, durch eine Sequenz von Transformationen

$$A\vec{x} = \vec{b} \quad \hat{=} \quad A^{(0)}\vec{x} = \vec{b}^{(0)} \qquad \text{Matrixelemente } a_{ij}^{(0)}$$

$$\downarrow$$

$$A^{(1)}\vec{x} = \vec{b}^{(1)} \qquad a_{ij}^{(1)}$$

$$\downarrow$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$A^{(N-1)}\vec{x} = \vec{b}^{(N-1)} \qquad a_{ij}^{(N-1)}$$

die ursprüngliche Matrix A auf eine obere Dreiecksmatrix zu überführen.

$$A^{(N-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(N-1)} & a_{12}^{(N-1)} & \cdots & a_{1N}^{(N-1)} \\ & a_{22}^{(N-1)} & a_{23}^{(N-1)} \cdots & a_{2N}^{(N-1)} \\ & & a_{33}^{(N-1)} \cdots & \vdots \\ 0 & & \ddots & \\ & & & a_{NN}^{(N-1)} \end{pmatrix}$$

d.h. $a_{ij}^{(N-1)} = 0$ für $i>j$

Wir können jetzt schon sehen, daß der zweite Schritt – die Berechnung von $\vec{x}$ – für eine derartige obere Dreiecksmatrix leicht möglich sein wird.

Besprechen wir aber zunächst, wie wir die sequentielle Erstellung dieser oberen Dreiecksmatrix im Detail durchführen:

Schritt 1:

Vorwärts-elimination

$$\boxed{a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} \cdot a_{1j}^{(0)}}$$

Zeilenindex $i = 2,3,\dots,N$

Spaltenindex $j = 1,2,\dots,N$

Von der i-ten Zeile wird das $\frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}$-fache der ersten Zeile abgezogen.

Das Ergebnis dieser ersten Transformation hat die Form

$$A^{(1)} = \left(\begin{array}{c|cccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1N} \\ \hline 0 & & & & \\ \vdots & & & A_{11}^{(1)} & \\ 0 & & & & \end{array} \right)$$

wobei für die erste Zeile gilt
$a_{1j}^{(1)} = a_{1j}^{(0)} = a_{1j}$

Dieses Spalten-Eliminationsverfahren wiederholen wir nun für alle weiteren Spalten $1 < n < N$. Für die n-te Spalte gilt:

$$\boxed{a_{ij}^{(n)} = a_{ij}^{(n-1)} - \frac{a_{in}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \cdot a_{nj}^{(n-1)}}$$

Zeilenindex $i = n+1, \ldots, N$
Spaltenindex $j = 1, 2, \ldots, N$

Für $j = n$ erkennen wir $a_{ij}^{(n)} = a_{in}^{(n)} = a_{in}^{(n-1)} - \frac{a_{in}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \cdot a_{nn}^{(n-1)} = 0$.

Nach $N-1$ Eliminationsschritten hat die Matrix $A^{(N-1)}$ somit die Form einer oberen Dreiecksmatrix.

Dabei ist darauf zu achten, daß für den Vektor $\vec{b}$ eine vollkommen analoge Sequenz von Transformationen durchgeführt werden muß, d.h.

$$\boxed{b_i^{(n)} = b_i^{(n-1)} - \frac{a_{in}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}} \cdot b_n}$$

Schritt 2: Rückwärts-einsetzen

Damit können wir zum zweiten Schritt im allgemeinen Verfahren gehen und aus der oberen Dreiecksmatrix $A^{(N-1)}$ und dem transformierten Vektor $\vec{b}^{(N-1)}$ den Vektor $\vec{x}$ berechnen.

Ⓐ Auflösen der letzten Zeile

$$a_{NN}^{(N-1)} \cdot x_N = b_N^{(N-1)} \longrightarrow x_N = \frac{b_N^{(N-1)}}{a_{NN}^{(N-1)}}$$

Ⓑ Einsetzen in die vorletzte Zeile und Auflösen

$$a_{N-1,N-1}^{(N-1)} x_{N-1} + a_{N-1,N}^{(N-1)} x_N = b_{N-1}^{(N-1)} \rightarrow x_{N-1}$$

Ⓒ Entsprechend weiter bis zur ersten Zeile.

Dieses Verfahren hat eine möglicher Schwachstelle: Die diagonalen Elemente $a_{nn}^{(n-1)}$ können sehr klein werden oder komplett verschwinden

$$a_{nn}^{(n-1)} = 0 \longrightarrow \frac{1}{a_{nn}^{(n-1)}} \rightarrow \infty \qquad \text{(oder große Rundungsfehler)}$$

Die Lösung hierzu ist eine sogenannte Pivotisierung, d.h. vor dem Eliminationsschritt vertauschen wir die Spalten und/oder Zeilen der verbleibenden Matrix so, daß das betragsmäßig größte Element auf der Diagonalen liegt.

Determinanten

Wir wollen uns abschließend kurz der Berechnung von Determinanten zuwenden. Betrachten wir dazu zunächst 2×2 Matrizen

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11} \cdot a_{22} - a_{12} a_{21}$$

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ 0 & a_{22} \end{pmatrix} = a_{11} \cdot a_{22} \qquad \text{(obere Dreiecksmatrix)}$$

Für den allgemeinen Fall gilt, daß die Determinante einer $N \times N$ Matrix zunächst definiert ist als

$$\det A \equiv |A| = \sum_P (-1)^P a_{1j_1} a_{2j_2} \cdot \ldots \cdot a_{Nj_N} \qquad \text{(Leibniz-Formel)}$$

Summe über alle Permutationen $(j_1, j_2, \ldots, j_N)$ der Indices, $N!$

Eine in der Praxis nützliche Definition ist die folgende

$$\det A \equiv |A| = a_{11} \cdot \det A_{11} - a_{12} \det A_{12} + a_{13} \det A_{13} - \ldots (\pm)\, a_{1N} \det A_{1N}$$

$\det A_{1j}$ Unterdeterminante für die Matrix A_{1j} in welcher die erste Zeile und j-te Spalte gestrichen ist

$$\det A \equiv |A| = a_{11} \cdot \det A_{11} - a_{21} \det A_{21} + a_{31} \det A_{31} - \ldots (\pm)\, a_{N1} \det A_{N1}$$

$\det A_{i1}$ Unterdeterminante für die Matrix A_{i1} in welcher die i-te Zeile und erste Spalte gestrichen ist.

(Laplace'scher Entwicklungssatz)

Damit können wir recht elegant die Determinante über die Gauß-Elimination berechnen.

Zunächst gilt, daß die Zeilenmultiplikation und -addition die Determinante nicht ändert, d.h.

$$|A| = |A^{(0)}| = |A^{(1)}| = \dots = |A^{(N-1)}| .$$

Für die Determinante der oberen Dreiecksmatrix $A^{(N-1)}$ gilt dann

$$|A^{(N-1)}| = a_{11}^{(N-1)} \cdot a_{22}^{(N-1)} \cdot a_{33}^{(N-1)} \cdot \ldots \cdot a_{NN}^{(N-1)}$$

denn für die Entwicklung nach der ersten Spalte gilt:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(N-1)} & a_{12}^{(N-1)} & \cdots & \\ & a_{22}^{(N-1)} & \cdots & A_{11} \\ & & \ddots & \\ 0 & & & a_{NN}^{(N-1)} \end{pmatrix}$$

$$\det A = a_{11} \cdot \det A_{11} + 0$$

$$\rightarrow \boxed{\det A = \prod_{i=1}^{N} a_{ii}^{(N-1)}}$$