Lineare Algebra

Themengebiete

- Vektoren, Matrizen
- Eigenwerte und Eigenvektoren
- Invertieren von Matrizen
- Lösen linearer Gleichungssysteme
  - Numerisches lösen von DGL

    $$\Delta f(x) = g(x) \tag{1}$$

    nachdem Δ diskretisiert wurde
  - Lösen von Integralgleichungen

    $$f(x) = g(x) + \int_0^1 k(x,y) f(y) dy \tag{2}$$

  - Lineare Fits

Vektornorm

Sei X ein komplexer bzw. reeller Raum, und $|.|$ eine lineare Abbildung von

$$|.| : X \to \mathbb{C}(\mathbb{R})$$

mit

- $|x| \geq 0$ (Positivität)
- $|x| = 0 \leftrightarrow x = 0$ (Definitheit)
- $|\alpha \cdot x| = |\alpha| \cdot |x| \;\; \forall x \in X \;, \;\; \forall \alpha \in \mathbb{C}$ (Homogenität)
- $|x + y| \leq |x| + |y| \;\; \forall x, y \in X$ (Dreiecksungleichung)

so nennt man $|.|$ eine Norm.

Beispiel:

$$|x|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \qquad \text{(Betragsssummennorm)} \tag{3}$$

$$|x|_2 = \sqrt{\sum_{i=i}^{n} x_i^2} \qquad \text{(Euklidische Norm)} \tag{4}$$

Skalarprodukt

Seien $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^n(\mathbb{R}^n)$ dann ist

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i \qquad \text{im komplexen} \qquad (5)$$

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \qquad \text{im rellen} \qquad (6)$$

das Skalarprodukt der beiden Vektoren.
In $\mathbb{R}^3$ gilt

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = |\mathbf{x}||\mathbf{y}| \cos \angle(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \qquad (7)$$

Oder in Matrixschreibweise

$$\langle x|y\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_{1i}^* y_{i1} \qquad (8)$$

Darstellung von Vektoren und Matrizen

Typischerweise werden Vektoren und Matrizen als Listen bzw. verschachtelte Listen dargestellt

- Python:

```
a=[[1,2],[2,0]]
```

- C (z.B. GSL):

```
m->data[0*m->tda+0]=1.;
gsl_matrix_set(m,0,1,2.);
gsl_matrix_set(m,1,0,2.);
gsl_matrix_set(m,1,1,0.);
```

- Mathematica:

```
a={ { 1,2},{2,0} }
```

Inversion der Matrix in Python (numpy)/MMA

Python

```
import numpy as np

a=[[ 1,2],[2,0]]
ainv=np.linalg.inv(a)

print(ainv)
print(np.dot(ainv,a))
```

Mathematica

```
a={ {1,2}, {2,0} }
ainv=Inverse[a]
ainv.a
```

Output

```
MathematicaScript -print all -f ./testmath
{{ 1, 2}, {2, 0}}
{{ 0, 1/2}, {1/2, -1/4}}
{{ 1, 0}, {0, 1}}
```

Inversion der Matrix in gsl

```
#include <stdio.h>
#include ``gsl/gsl_matrix.h''
#include ``gsl/gsl_linalg.h''

int main()
{

gsl_matrix *m;
gsl_matrix *minv;
gsl_permutation *p;
int s;

p=gsl_permutation_calloc(2);
m=gsl_matrix_alloc(2,2);
minv=gsl_matrix_alloc(2,2);

m->data[0*m->tda+0]=1.;
gsl_matrix_set(m,0,1,2.);
gsl_matrix_set(m,1,0,2.);
gsl_matrix_set(m,1,1,0.);

gsl_linalg_LU_decomp (m, p, &s);
gsl_linalg_LU_invert(m,p,minv);

printf(``The inverse is\n'');

printf(``%lf , %lf\n'',gsl_matrix_get(minv,0,0),gsl_matrix_get(minv,0,1));
printf(``%lf , %lf\n'',gsl_matrix_get(minv,1,0),gsl_matrix_get(minv,1,1));

return 0;

}
```

Vektoren und Matrizen in der Physik

Praktisch werden in der Physik ständig Vektoren und Matrizen gebraucht:

- Mechanik (Kräftevektoren)
- Geometrische Optik
- Quantenmechanik

Einige Definitionen sind hierbei gebräuchlich, insbesondere hinsichtlich Darstellung von Matrizen über ihre Einträge.

Matrizen

Darstellung einer Matrix über Einträge (*Koordinatenform*)

$$A_{n\times m} = a_{ij} \;\; \text{mit } i \leq n \,, j \leq m \tag{9}$$

In dieser Schreibweise ist das Produkt zweier Matrizen:

$$A \cdot B = \sum_j a_{ij} b_{jm} = a_{ij} b_{jm} = c_{im} \tag{10}$$

Damit sind auch die beim Skalarprodukt eingegführten bras und kets

$$\langle x|_i = x_{1i} \qquad \text{(Zeilenvektor)} \tag{11}$$

$$|y\rangle_i = y_{i1} \qquad \text{(Spaltenvektor)} \tag{12}$$

Man lässt häufig die Summenzeichen weg und meint das über gleiche Indices summiert wird $\equiv$ Einsteinsche Summenkonvention.

Einige Operationen mit Matrizen:

- Transposition

$$A^T = (a_{ij})^T = a_{ji}$$
$$(A \cdot B)^T = (a_{ij} b_{jm})^T = b_{mj} a_{ji} = B^T \cdot A^T \tag{13}$$

- Adjungierte

$$(A^T)^* = A^\dagger = \left((a_{ij}^T)^*\right) = a_{ji}^* \tag{14}$$

- Spur

$$\mathrm{Tr}(A) = a_{ii} \tag{15}$$

- Determinante

$$\det A = \epsilon_{i_1 \ldots i_n} a_{1 i_1} \ldots a_{n i_n} \tag{16}$$

- ϵ ist der Levi-Civita-Tensor mit den Eigenschaften

$$\epsilon_{ijk\ldots} = \begin{cases} +1 \text{ falls } (i,j,k,\ldots) \text{ gerade Permutation} \\ -1 \text{ falls } (i,j,k,\ldots) \text{ ungerade Permutation} \\ 0 \text{ wenn mindesten zwei Indices gleich sind} \end{cases} \tag{17}$$

- Häufig auch Kreuzprodukt zweier Vektoren in Matrixschreibweise

$$(\vec{a} \times \vec{b})_i = \epsilon_{ijk} a_j b_k \tag{18}$$

Hier das Bsp.

$$\vec{a} \cdot (\vec{a} \times \vec{b}) = a_i \epsilon_{ijk} a_j b_k = -\epsilon_{jik} a_i a_j b_k = 0 \tag{19}$$

Besondere Matrizen, z.B.

- Hermitesch (Symmetrisch)

$$A^\dagger = A \tag{20}$$

$$(a_{ij})^\dagger = a_{ji}^* = a_{ij} \tag{21}$$

- Unitär (Orthogonal)

$$A^\dagger = A^{-1} \tag{22}$$

Weshalb sind diese beiden Eigenschaften so besonders?

- Hermitesch $\Rightarrow$ reelle Eigenwerte (physik. Observable)
- Unitär $\Rightarrow$ Normerhaltende Transformationen (Basiswechsel), alle EW liegen auf Einheitskreis

Zeige beide Eigenschaften in Hilbertraum

Hermitesch (sei A Eigenzustand zu O mit Eigenwert a), d.h.

$$O|A\rangle = a|A\rangle$$

Zunächst versteht sich in bra-ket-Schreibweise

$$\begin{aligned} O|A\rangle^\dagger &= \left(O_{ij}A_{j1}\right)^\dagger \\ &= \left(A^*_{1j}O^*_{ji}\right) \\ &= \langle A|O^\dagger \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned} \langle A|O|A\rangle &= a\langle A|A\rangle \\ \langle A|O|A\rangle &= \langle A|O^\dagger|A\rangle^* = \langle A|O|A\rangle^* \\ &= a^*\langle A|A\rangle \\ \Rightarrow a &= a^* \end{aligned} \tag{24}$$

Zeige beide Eigenschaften in Hilbertraum

Operator U ist unitär.

$$\begin{aligned}
\langle A|A\rangle &= \langle A|\underbrace{U^\dagger U}_{1}|A\rangle \\
&= \underbrace{\Big(\langle A|U^\dagger\Big)}_{u^*\langle A|}\underbrace{\Big(U|A\rangle\Big)}_{u|A\rangle} \\
&= u^* u\langle A|A\rangle \\
\Rightarrow u^* u &= 1
\end{aligned} \tag{25}$$

Eigenwerte haben Norm 1 $\Rightarrow u = e^{i\phi}$
Häufige Frage: Finde eine unitäre Transformation, sodass eine Matrix Diagonalform annimmt (z.B. Hauptachsentrafo)

Eigenwerte und Eigenvektoren

- Eigenwertgleichung für Operator O mit EV A_i und EW n_i

$$OA_i = n_i A_i \tag{26}$$

- Bestimmung über charakteristisches Polynom

$$\det(O - \lambda I) = 0 \tag{27}$$

  Nullstellen sind die Eigenwerte.
- Trafo

$$UOU^\dagger = \tilde{O} \tag{28}$$

  wobei U zeilenweise EV sind

$$U = \begin{pmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & \dots & A_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{n,1} & A_{n,1} & \dots & A_{n,n} \end{pmatrix} \tag{29}$$

- Maximaler EW (betragsmässig) wird spektraler Radius genannt

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| | \lambda \in \sigma(A)\} \tag{30}$$

Beispiel:

$$
\begin{aligned}
M &= \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \\
\det(M - \lambda I) &= \lambda^2 - 5 = 0 \\
\lambda_{1,2} &= \pm\sqrt{5} \\
(M - \lambda_{1,2} I) v_{1,2} &= 0 \\
v_1 &= (2 - \sqrt{5}, 1) \\
v_2 &= (2 + \sqrt{5}, 1) \\
U &= \begin{pmatrix} 2 - \sqrt{5} & 1 \\ 2 + \sqrt{5} & 1 \end{pmatrix} \\
U M U^\dagger &= \begin{pmatrix} -10\left(-2 + \sqrt{5}\right) & 0 \\ 0 & 10\left(2 + \sqrt{5}\right) \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{31}
$$

Matrixzerlegungen

- Für alle Matrizen $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ existiert eine unitäre Matrix $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ derart, dass
$$M = UAU^\dagger \tag{32}$$
eine rechte obere Dreiecksmatrix ist.
- Sollte A hermitesch sein ist M diagonal.
- Definiere die Koniditionszahl einer Matrix A
$$\mathrm{cond}(A) = |A|_a |A^{-1}|_a \tag{33}$$
mit $|A|_a := \sup\limits_{|x|_a=1} |Ax|_a$ induzierte Matrixnorm. Je größer diese Zahl, desto schlechter konvergieren iterative Löser
- Schreibe Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ um
$$UAV^T = \mathrm{diag}\{\sigma_1, \ldots, \sigma_n\} \tag{34}$$
mit U und V orthogonale Matrizen und
$$0 < \sigma_1 \leq \cdots \leq \sigma_n \qquad \text{(Singulärwerte)} \tag{35}$$

Singulärwertzerlegung

- Bestimmungsgleichung der Singulärwerte

$$\det(A^T A - \sigma_i^2 I) = 0 \tag{36}$$

- SW sind EW von $A^T A$
- Damit ist V unitäre (orthogonale) Trafo

$$VA^T AV^T = \mathrm{diag}\{\sigma_1^2, \ldots, \sigma_n^2\} \tag{37}$$

  zeilenweise EV von $A^T A$
- U lässt sich über das Inverse bestimmen

$$U = \mathrm{diag}\{\sigma_1, \ldots, \sigma_n\} \left(AV^T\right)^{-1} \tag{38}$$

- Konditionszahl ist dann

$$\mathrm{cond}(A) = \frac{\sigma_n}{\sigma_1} \tag{39}$$

Singulärwertzerlegung hat viele Anwendungen

- Einfache Bildung der inversen, da U und V unitär (orthogonal sind) braucht nur noch die Kehrwerte der Diagonalmatrix
- Bestimmung der Pseudoinversen
- Lösung des LeastSquare-Problems

Es existieren noch weitere Zerlegungen (LR, QR, Cholesky usw.)

Inversion von Matrizen

Generell gehen wir von quadratischen Matrizen aus.

- Direkte Verfahren z.B. über Adjunkte, SVD oder andere Zerlegungen
- Iterative Verfahren (Splitting-Verfahren z.B. Jacobi)

Frage der Eindeutigkeit von Lösungen zu $Ax = b$

- Inverse existiert wenn $\det(A) \neq 0$
- $\vdots$

$$A^{-1} = \frac{\mathrm{adj}(A)}{\det(A)} \tag{40}$$

Verfahren über Adjunkte

Die Adjunkte ist definiert

$$\mathrm{adj}(A) = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11} & \tilde{a}_{12} & \dots & \tilde{a}_{1n} \\ \tilde{a}_{21} & \tilde{a}_{22} & \dots & \tilde{a}_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ \tilde{a}_{n1} & \tilde{a}_{n2} & \dots & \tilde{a}_{nn} \end{pmatrix}^T$$

$$\tilde{a}_{ij} = (-1)^{i+j} \det \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1j-1} & a_{1j+1} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ a_{i-11} & \dots & a_{i-1j-1} & a_{i-1j+1} & \dots & a_{i-1n} \\ a_{i+11} & \dots & a_{i+1j-1} & a_{i+1j+1} & \dots & a_{i+1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & \dots & a_{nj-1} & a_{nj+1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \tag{41}$$

Python

```python
import numpy as np

def adjunkte(a):
    b=np.zeros( (len(a),len(a)))
    for i in range(len(a)):
        for j in range(len(a)):
            subdet=np.linalg.det(np.delete(np.delete(a,i,0),j,1))
            b[i,j]=(-1)**(i+j)*subdet
    return np.transpose(b)

def inv(a):
    return adjunkte(a)/np.linalg.det(a)
```

Über SVD

- Nutze aus, dass in der Zerlegung

$$USV^T = A \tag{42}$$

  U und T unitär (orhtogonal) sind

$$\begin{aligned} A^{-1} &= \left(V^T\right)^{-1} S^{-1} U^{-1} \\ &= V S^{-1} U^T \end{aligned} \tag{43}$$

- Die inverse der Diagonalmatrix sind einfach die Kehrwerte in der Diagonalen

Splitting-Verfahren

Ziel ist es eine Fixpunktiteration zu bekommen

$$x_{n+1} = F(x_n) \tag{44}$$

Wir lösen allgemein:

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{45}$$

- Iterationsverfahren ist geg. durch Abbildung $F : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ und heißt linear wenn

$$F(\mathbf{x}, \mathbf{b}) = M\mathbf{x} + N\mathbf{b} \tag{46}$$

- $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$ bezeichnen wir als Fixpunkt der Abb. $F : \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$, wenn

$$\mathbf{x} = F(\mathbf{x}, \mathbf{b}) \tag{47}$$

  mit $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^n$.
- F heißt konsistent zur Matrix A, wenn

$$\mathbf{x} = \lim_{n\to\infty} \mathbf{x}_n = \lim_{n\to\infty} F(\mathbf{x}_{n-1}, \mathbf{b}) \quad \text{unabh. vom Startwert}$$

- Iterationsverfahren genau dann konvergent wenn

$$\rho(M) < 1 \tag{48}$$

  der Spektralradius der Iterationsmatrix < 1 ist.
- Splitting-Methode

$$\begin{aligned} A &= B + (A - B) \\ \Rightarrow A\mathbf{x} &= b \\ B\mathbf{x} &= (B - A)\mathbf{x} + \mathbf{b} \\ \rightarrow \mathbf{x} &= \underbrace{B^{-1}(B - A)}_{M} x + \underbrace{B^{-1}}_{N} \mathbf{b} \end{aligned} \tag{49}$$

- Lineares Iterationsverfahren

$$x_{n+1} = F(x_n, b) = Mx_n + Nb \tag{50}$$

Jacobi-Verfahren

- Wenn A nichtverschwindende Diagonalelemente aufweist $a_{ii} \neq 0$ benutze

$$
\begin{aligned}
D &= \mathrm{diag}\{a_{11}, \ldots, a_{nn}\} \\
M &= D^{-1}(D - A) \\
N &= D^{-1}
\end{aligned}
$$

Iteration

$$x = D^{-1}(D - A)\mathbf{x} + D^{-1}\mathbf{b} \tag{51}$$

- Wiederum Inversion der Diagonalmatrix ist sehr einfach.
- Konvergenz wenn spektraler Radius von M < 1

Weitere Verfahren

- Gauß-Seidel $\equiv$ Splittingverfahren
- Mehrgitteverfahren
- Projektive Verfahren (Krylov-Unterraum-Methoden)

Nichtquadratische Matrizen

Was macht man bei Nichtquadratischen Matrizen $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$?

- *Erzeuge* quadratische Matrix

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ \Rightarrow A^T A x &= A^T b \\ x &= \underbrace{\left(A^T A\right)^{-1} A^T}_{P} b \end{aligned} \tag{52}$$

  P ist pseudoinverse

- Sollte $A^T A$ nicht invertierbar sein definiert man die Pseudoinverse über die SVD bei der man die SW < ϵ vernachlässigt.

Least-Squares-Problem

- Beziehung zum Least-Squares-Problem

$$r = Ax - y \tag{53}$$

definiert das Residuum, dann ist das Abstandsquadrat

$$\begin{aligned} |r|^2 = r^T r &= (x^T A^T - y^T)(Ax - y) \\ &= x^T A^T Ax - x^T A^T y - y^T Ax + y^T y \\ &= x^T A^T Ax - 2y^T Ax + y^T y \end{aligned} \tag{54}$$

- Finde das Minimum (1.Abl Null setzen)

$$\begin{aligned} \nabla |r|^2 &= 2A^T Ax - 2yA^T = 0 \\ \Rightarrow A^T Ax &= A^T y \end{aligned} \tag{55}$$