Mathematik Zusammenfassung: Tutorium 7

3. Dezember 2019

1 Das Eigenwertproblem

Im Folgenden wollen wir uns mit Matrixgleichungen beschäftigen, die ein sogenanntes „Eigenwertproblem“ darstellen. Dieses Problem stellt einen wichtigen Spezialfall eines LGS dar, das vor allem in der Quantenchemie (Stichwort: SCHRÖDINGER-Gleichung), dar. Eine Eigenwertgleichung wird dadurch charakterisiert, dass ein linearer Operator (in Matrixdarstellung) $\underline{A}$, welcher auf einen Vektor $|v\rangle$ wirkt, nur dessen Betrag, aber nicht dessen Richtung ändert. Dies wollen wir formal festhalten.

Definition (Eigenwert, Eigenvektor): *Gegeben sei eine lineare Matrixgleichung $\underline{A}\,|v\rangle = \lambda\,|v\rangle$. Als Lösungspaare $(\lambda, |v\rangle)$ dieses sogenannten Eigenwertproblems werden nur nicht-triviale Vektoren, also $|v\rangle \neq 0$ akzeptiert. Der Skalar λ (welcher Null sein darf) heißt Eigenwert und der Vektor $|v\rangle$ Eigenvektor.*

In der Regel gibt es zu einem Eigenwertproblem mehrere Lösungen. Wichtig: Die Lösungen bestehen dabei immer aus einem Paar, also aus aus Eigenwert *und* dem zugehörigen Eigenvektor. Für die Lösung eines Eigenwertproblemes gibt es ein Verfahren, dass immer zum Ziel führt:

i) Die Eigenwerte sind die Lösungen des charakteristischen Polynoms $\det\left(\underline{A} - \lambda\underline{E}\right) = 0$.

ii) Die Eigenvektoren zu einem Eigenwert können ausgehend von $\left(\underline{A} - \lambda_i\underline{E} \middle| \underline{E}\right)$ mithilfe des Bild-Kern Algorithmus bestimmt werden.

Dieses Verfahren wollen wir anhand eines Beispiels üben.

Beispiel (Lösung des Eigenwertproblemes):

Gegeben ist die Matrix

$$\underline{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Es sollen die Eigenwerte und die Eigenvektoren dieser linearen Abbilsung bestimmt werden. Vorgehen:

i) Wir berechnen die Determinatne $\det\left(\underline{A} - \lambda\underline{E}\right)$:

$$\det\left(\underline{\mathrm{A}} - \lambda\underline{\mathrm{E}}\right) = \det\begin{pmatrix} 2-\lambda & 0 \\ 1 & 1-\lambda \end{pmatrix} = (2-\lambda)(1-\lambda)\ .$$

Das entstandende Polynom wird als charakteristisches Polynom bezeichnet. Die Nullstellen des charakteristischen Polynoms sind die Eigenwerte. In diesem Fall ist das Polynom bereits in Linearfaktoren zerlegt und wir können wir die Eigenwerte sofort ablesen: $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 2$.

ii) Nun müssen wir die Eigenvektotren $\vec{v_i}$ zu den den Eigenwerten λ_i berechnen. Dies passiert folgendermaßen:

Eigenvektor $\vec{v_1}$ zu Eigenwert $\lambda_1 = 1$: Zuerst wird die Matrix $\underline{\mathrm{A}} - \lambda_1\underline{\mathrm{E}} = \underline{\Lambda}_1$ berechnet.

$$\underline{\Lambda}_1 = \begin{pmatrix} 2-1 & 0 \\ 1 & 1-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Nun wird $\underline{\Lambda}_1$ in den Bild-Kern-Algorithmus $\left(\underline{\Lambda}_1 \middle| \underline{\mathrm{E}}\right)$ „gesteckt“, also die linke Seite so lange (elementar) umgeformt, bis eine Nullspalte entsteht. Wir haben in diesem Fall Glück, denn $\underline{\Lambda}_1$ hat bereits eine Nullspalte.

$$\left(\underline{\Lambda}_1 \middle| \underline{\mathrm{E}}\right) = \left(\begin{array}{cc|cc} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

Dort, wo auf der linken Seite die Nullspalte steht, steht auf der rechten Seite der Eigenvektor. Zu dem Eigenwert $\lambda_1 = 1$ gehören also dieser Vektor und alle seine Vielfachen $\vec{v_1} = \mu(0,1)^{\mathrm{T}}$.

Eigenvektor $\vec{v_2}$zu Eigenwert $\lambda_2 = 2$: Zuerst wird die Matrix $\underline{\mathrm{A}} - \lambda_2\underline{\mathrm{E}} = \underline{\Lambda}_2$ berechnet.

$$\underline{\Lambda}_2 = \begin{pmatrix} 2-2 & 0 \\ 1 & 1-2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Der Ausdruck $\left(\underline{\Lambda}_2 \middle| \underline{\mathrm{E}}\right)$ wird nun mit dem Bild-Kern-Algorithmus umgeformt, da noch keine Nullspalte vorhanden ist. Die Nullspalte kann allerdins schon mit einem Schritt erreicht werden, indem wir die Einträge der ersten Spalte auf die zweite hinzuaddieren:

$$\left(\underline{\Lambda}_1 \middle| \underline{\mathrm{E}}\right) = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \end{array}\right) \xrightarrow{(ii)+(i)} \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

Somit können wir den zweiten Eigenvektor ebenfalls einfach ablesen. Zu dem Eigenwert $\lambda_2 = 2$ gehört also die Vielfachen $\vec{v_2} = \mu(1,1)^{\mathrm{T}}$.

2 Diagonalisierung

Eine lineare Abbildung durch eine Matrix wird immer bezüglich einer Basis dargestellt. Die Wahl der Basis beinflusst dabei die Einträge der Matrix. Wenn eine diagonalisierbare Matrix vorliegt, dann wird diese Matrix, wenn man sie bezüglich einer Basis aus Eigenvektoren darstellt, eine Diagonalmatrix. Mit Diagonalmatrizen lässt sich sehr angenehm rechnen, beispielsweise sind die Eigenwerte einer Diagonalmatrix auf der Hauptdiagonalen zu finden und die Determinante ist gleich dem Produkt der Einträge der Hauptdiagonalen.

Wie überführt man nun eine Matrix in ihre diagonale Gestalt? Nun, zuerst sollten wir überprüfen, ob dies überhaupt möglich ist. Nicht jede Matrix ist diagonalisierbar. Hierfür müssen wir die *algebraische Vielfachheit* $a(\lambda_i)$ des charakteristischen Polynoms und die *geometrische Vielfachheit* $g(\lambda_i)$ der Eigenvektoren betrachten. Was bedeuten diese Begriffe?

- Die algebraische Vielfachheit $a(\lambda_i)$ gibt an, wie oft ein Eigenwert entartet ist.
- Die geometrische Vielfachheit $g(\lambda_i)$ gibt die Menge aller Eigenvektoren zu diesem Eigenwert an.

Ein Beispiel verdeutlicht diese Begriffe.

Beispiel (algebraische und geometrische Vielfachheit):

Wir betrachten erneut die Matrix

$$\underline{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte und Eigenvektoren hatten wir im ersten Abschnitt bereits bestimmt: $\vec{v}_1 = \mu(0,1)^{\mathrm{T}}$ ist der Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = 1$ und $\vec{v}_2 = \mu(1,1)^{\mathrm{T}}$ ist der Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_2 = 2$. Da λ_1 und λ_2 einfache Nullstellen des charakteristischen Polynoms sind, sind sie einfach entartet. Es gilt: $a(\lambda_1) = a(\lambda_2) = 1$. Da jeweils ein Eigenvektor zu einem Eigenwert gehört, gilt analog $g(\lambda_1) = g(\lambda_2) = 1$.

Der folgende Satz bestimmt nun, ob unsere Matrix diagonalisierbar ist oder nicht.

Definition (Diagonalisierbarkeit): *Eine quadratische Matrix $\underline{\mathrm{A}}$ ist diagonalisierbar, wenn ihre algebraische und geometrische Vielfachheit gleich sind.*

Dies ist für unsere Matrix der Fall. Wie bereits erwähnt, besteht die Hauptdiagonale der entsprechenden Diagonalmatrix aus den Eigenwerten (und die restlichen Einträge sind Null). Das heißt wir können die Diagonalmatrix sofort hinschreiben:

$$\underline{\mathrm{D}}_{\mathrm{A}} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

Anmerkung: Tatsächlich leitet man die Diagonalform mathematisch streng her, indem meine eine Transformation der Matrixdarstellung durch einen Basiswechsel durchführt. Dann berechnet sich die Diagonalmatrix durch die „Ähnlichkeitstransfomration“ $\underline{\mathrm{D}}_{\mathrm{A}} = \underline{\mathrm{X}}^{-1}\underline{\mathrm{A}}\,\underline{\mathrm{X}}$, wobei $\underline{\mathrm{X}}$ diejenige Matrix ist, deren Spalten die Eigenvektoren sind. Weil wir aber wissen, dass die Eigenwerte auf der Hauptdiagonalen liegen, müssen wir den Basuswechsel (i. d. R.) nich explizit ausrechnen.

Zum Abschluss betrachten wir eine Matrix, die nicht diagonalisierbar ist:

$$\underline{\mathrm{B}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Das charakteristische Polynom von $\underline{\mathrm{B}}$ lautet $(1-\lambda)(1-\lambda) = (1-\lambda)^2$. D. h. der Eigenwert $\lambda_{1,2} = 1$ ist eine doppelte Nullstelle des charakteristischen Polynoms, also zweifach entartet. Die algebraische Vielfachheit ist demnach $a\left(\lambda_{1,2}\right) = 2$. Um die geometrische Vielfachheit zu bestimmen, müssen wir die Eigenvektoren von $\lambda_{1,2} = 1$ berechnen:

Eigenvektoren zu Eigenwert $\lambda_{1,2} = 1$:

$$\underline{\Lambda}_{1,2} = \begin{pmatrix} 1-1 & 0 \\ 1 & 1-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Wir erkennen, dass $\underline{\Lambda}_{1,2}$ bereits eine Nullzeile besitzt. Demnach können wir den Eigenwert sofort ablesen:

$$\left(\underline{\Lambda}_{1,2}\middle|\underline{\mathrm{E}}\right) = \left(\begin{array}{cc|cc} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right).$$

Wir finden also einen Eigenvektor $\vec{v}_1$ zu den Eigenwerten $\lambda_{1,2} = 1$. Demnach ist die geometrische Vielfachheit $g\left(\lambda_{1,2}\right) = 1$.

Da $a\left(\lambda_{1,2}\right) = 2 \neq 1 = g\left(\lambda_{1,2}\right)$ ist die Matrix $\underline{\mathrm{B}}$ nicht diagonalisierbar. Hätten wir zwei Eigenvektoren zu $\lambda_{1,2} = 1$ gefunden (was prinzipiell ebenfalls möglich ist), dann wäre $g\left(\lambda_{1,2}\right) = 2$ und die Matrix wäre diagonalisierbar.