

10. Teil: Elemente der Linearen Algebra

Skalare und Vektoren

Manche physikalische Größen, wie Temperatur T oder Masse m , erfordern zu ihrer Festlegung (oder Messung) nur die Angabe eines Zahlenwertes — einer Masszahl — zu vorgegebener oder vorgewählter Masseinheit. Andere physikalische Größen dagegen, wie Geschwindigkeit \mathbf{v} (auch als \vec{v} geschrieben) oder Kraft \mathbf{F} (auch als \vec{F} geschrieben), haben mehrere Komponenten, jede bestehend aus Masszahl und Masseinheit, die sich zu Informationen über die **Richtung** sowie die **Länge** (oder den **Betrag**) der physikalischen Größe zusammensetzen lassen. Die erste Art physikalischer Größen sind **skalare Größen** (kurz: **Skalare**), die zweite Art dagegen **vektorielle Größen** (kurz: **Vektoren**).

Anmerkung: Die mathematische Definition von Skalaren und Vektoren beruht auf ihrem Verhalten bei Änderung der sogenannten Basis in einem Vektorraum (Basistransformation). Skalare ändern sich dabei nicht, Vektoren tun dies dagegen auf eine ganz bestimmte Weise (Näheres s. Lehrbücher der Mathematik für Naturwissenschaftler).

Die **Länge** (der **Betrag**) des Vektors \mathbf{a} wird üblicherweise mit $a = |\mathbf{a}|$ bezeichnet. Die Länge eines Vektors ist immer positiv, ausser im Falle des Nullvektors \mathbf{o} (dieser ist der einzige Vektor, der keine Richtung hat, seine Länge ist $|\mathbf{o}| = 0$). Jeder Vektor $\mathbf{a} \neq \mathbf{o}$ kann zusammengesetzt werden aus seiner Länge a ($a > 0$) und einem **Einheitsvektor** \mathbf{e}_a , der die Richtung des Vektors \mathbf{a} angibt. Ein Einheitsvektor ist ein Vektor von Länge 1. Es lässt sich dann also schreiben:

$$\mathbf{a} = a \mathbf{e}_a, \quad \mathbf{e}_a = \frac{\mathbf{a}}{a} = \frac{1}{a} \mathbf{a}, \quad |\mathbf{e}_a| = 1.$$

Ein Vektor hat im allgemeinen keinen festgelegten Anfangspunkt, er darf beliebig parallel verschoben werden (deswegen sagt man auch, ein Vektor sei „ein Repräsentant einer Pfeilklassse“). Eine Ausnahme von dieser Regel bilden Ortsvektoren, die von einem vereinbarten Punkt in einem Koordinatensystem (z. B. dem Ursprung des Koordinatensystems) ausgehen.

Rechenregeln für Vektoren

Vektoren lassen sich durch **Addition** miteinander verknüpfen (wie beim Kräfteparallelogramm aus dem Physikunterricht in der Schule), und bilden dabei eine mathematische Struktur ähnlich jener, welche die ganzen Zahlen unter Addition bilden: eine **kommutative Gruppe**. Es gelten also die folgenden Beziehungen:

- Existenz der Summe und Kommutativgesetz bzgl. Vektoraddition: Für alle \mathbf{a} und \mathbf{b} gilt

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{b} + \mathbf{a} = \mathbf{c}.$$

- Assoziativgesetz bzgl. Vektoraddition: Für alle \mathbf{a} , \mathbf{b} und \mathbf{c} gilt

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b}) + \mathbf{c} = \mathbf{a} + (\mathbf{b} + \mathbf{c}).$$

- Existenz eines neutralen Elements bzgl. Vektoraddition (Nullvektor): Für alle \mathbf{a} gilt

$$\mathbf{a} + \mathbf{o} = \mathbf{a}.$$

- Existenz inverser Elemente bzgl. Vektoraddition: Zu jedem \mathbf{a} existiert ein \mathbf{b} , so dass gilt

$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{o} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{b} = -\mathbf{a}.$$

Die letzte Beziehung weist darauf hin, dass noch eine weitere Rechenart bei Vektoren definiert sein muss, nämlich die **Multiplikation mit einem Skalar** (kurz: S-Multiplikation), denn

genau genommen ist $\mathbf{b} = -\mathbf{a} = (-1)\mathbf{a}$. Auch die Schreibweise $\mathbf{a} = a\mathbf{e}_a$ (s. o.) erfordert diese Rechenart. In der Praxis treten hpts. reelle oder komplexe Zahlen als Skalare auf. Es gelten folgende Rechenregeln für alle Vektoren \mathbf{a}, \mathbf{b} und alle Skalare λ, μ :

$$\lambda\mathbf{a} + \mu\mathbf{a} = (\lambda + \mu)\mathbf{a}, \quad \lambda(\mu\mathbf{a}) = (\lambda \cdot \mu)\mathbf{a}, \quad \lambda(\mathbf{a} \pm \mathbf{b}) = \lambda\mathbf{a} \pm \lambda\mathbf{b}.$$

Durch die Multiplikation mit einem Skalar $\lambda \in \mathbb{R}$ kann ein Vektor \mathbf{a} gestreckt werden ($\lambda > 1$), gestaucht werden ($0 < \lambda < 1$) oder auch umgekehrt werden ($\lambda < 0$). Eine auf diese Weise aus Vektoren und Skalaren (reellen oder komplexen Zahlen) aufgebaute mathematische Struktur heisst ein **Vektorraum (linearer Raum) über dem Körper**⁹ \mathbb{R} (\mathbb{C}).

Bei der Vektoraddition gilt die Dreiecksungleichung: $|\mathbf{a} + \mathbf{b}| \leq |\mathbf{a}| + |\mathbf{b}|$.

Frage: Wann gilt das Gleichheitszeichen in der Dreiecksungleichung?

Zusammensetzen und Zerlegen von Vektoren

Die eben genannten Rechenregeln ermöglichen die Zusammensetzung eines Vektors \mathbf{a} aus mehreren Teilen, oder, umgekehrt gelesen, seine Zerlegung in mehrere Teile, z. B.

$$\mathbf{a} = \alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{v} + \gamma\mathbf{w}.$$

Die rechte Seite dieser Gleichung ist eine „gewichtete Summe“ (eine **Linearkombination**) der Vektoren \mathbf{u}, \mathbf{v} und \mathbf{w} . Die einzelnen Summanden $\alpha\mathbf{u}$ usw. heissen **Komponenten** des Vektors \mathbf{a} . Von grösster Bedeutung für die Praxis der Vektorrechnung ist die Zerlegung eines Vektors \mathbf{a} in eine Linearkombination von **linear unabhängigen Komponenten**.¹⁰ Besonders bequem lässt es sich arbeiten mit Komponenten, die **zueinander orthogonal** (d. h. zueinander senkrecht) sind und mit Einheitsvektoren aufgebaut worden sind. Im gewohnten Anschauungsraum also

$$\mathbf{a} = a_x\mathbf{e}_x + a_y\mathbf{e}_y + a_z\mathbf{e}_z = a_x\mathbf{i} + a_y\mathbf{j} + a_z\mathbf{k}.$$

Hier sind die Vektoren $\mathbf{e}_x = \mathbf{i}, \mathbf{e}_y = \mathbf{j}, \mathbf{e}_z = \mathbf{k}$ Einheitsvektoren in einem kartesischen Achsensystem. Sie bilden eine **Basis**¹¹ für den Vektorraum der Vektoren im Anschauungsraum, die Zahl der Elemente in der Basis (hier: 3) heisst die **Dimension** des Vektorraums. Die Skalare a_x, a_y, a_z heissen **kartesische Koordinaten** des Vektors \mathbf{a} bzgl. der Basis $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$.

Nach Vereinbarung einer Basis genügt die Angabe des Koordinatensatzes, um einen Vektor eindeutig zu beschreiben. Dazu werden einfach geordnete n -Tupel $\underline{a} \in \mathbb{R}^n$ verwendet, die in diesem Zusammenhang üblicherweise als Spaltenvektoren geschrieben werden. Für unseren Anschauungsraum werden also geordnete Zahlentripel verwendet:

$$\mathbf{a} = a_x\mathbf{i} + a_y\mathbf{j} + a_z\mathbf{k} \quad \mapsto \quad \underline{a} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Die oben definierten Rechenoperationen für Vektoren (Addition, S-Multiplikation) lassen sich sehr einfach auf die geordneten n -Tupel, die neue Kurznotation für Vektoren, übertragen:

$$\underline{a} + \underline{b} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x + b_x \\ a_y + b_y \\ a_z + b_z \end{pmatrix}, \quad \lambda \underline{a} = \begin{pmatrix} \lambda a_x \\ \lambda a_y \\ \lambda a_z \end{pmatrix}.$$

⁹ Bekannte Körper (im mathematischen Sinn) sind die Mengen der rationalen Zahlen (\mathbb{Q}), der reellen Zahlen (\mathbb{R}) oder der komplexen Zahlen (\mathbb{C}), zusammen mit den bekannten Rechenregeln für Addition und Multiplikation.

¹⁰ Eine Menge von Vektoren $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}$ heisst *linear unabhängig*, wenn die einzige Möglichkeit, den Nullvektor als Linearkombination der Vektoren zu schreiben, $\sum_{i=1}^n \lambda_i \mathbf{a}_i = \mathbf{o}$, in der Wahl $\lambda_i = 0$ für alle i besteht.

¹¹ Eine *Basis* eines Vektorraums ist eine Menge linear unabhängiger Vektoren, aus welchen jeder(!) Vektor des Vektorraums durch Linearkombination zusammengesetzt werden kann. Die kartesischen Einheitsvektoren bilden eine sogenannte *Orthonormalbasis*, eine Basis aus Vektoren, die zueinander senkrecht und alle von Länge 1 sind.

Auch für einfache geometrische Objekte, wie **Geraden** und **Ebenen**, lassen sich mit beiden Schreibweisen knappe Definitionsgleichungen angeben (Punkt-Richtungs-Form, mit $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$):

$$\text{Gerade } g: \quad \mathbf{r} = \mathbf{p} + \lambda \mathbf{a} \quad \mapsto \quad \underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix}$$

$$\text{Ebene } e: \quad \mathbf{r} = \mathbf{p} + \lambda \mathbf{a} + \mu \mathbf{b} \quad \mapsto \quad \underline{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} + \mu \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix}$$

Hier ist \mathbf{p} der Ortsvektor zu einem Aufpunkt der Geraden (der Ebene), und \mathbf{a} und \mathbf{b} sind voneinander linear unabhängige Richtungsvektoren. Mit diesen Gleichungen lassen sich Geraden und Ebenen leicht(er) handhaben und ihre Eigenschaften bequem untersuchen (dies führt in das Gebiet der **analytischen Geometrie**).

Skalarprodukt von Vektoren (im 3dim. Anschauungsraum)

Von den verschiedenen Arten von Produkten von Vektoren sei hier nur das wichtigste vorgestellt, das **Skalarprodukt** (bei Verwendung der gewohnten kartesischen Orthonormalbasis):

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = ab \cos(\varphi) \quad \mapsto \quad \underline{a} \cdot \underline{b} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix} = a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z.$$

Hier ist $\varphi = \angle(\mathbf{a}, \mathbf{b})$ der Winkel zwischen den Vektoren \mathbf{a} und \mathbf{b} . Wie der Name deutlich sagt, ist das Skalarprodukt ein Skalar, also eine Zahl. Spezialfälle ergeben sich, wenn die beiden Vektoren parallel zueinander sind ($\varphi = 0$: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = ab$), oder wenn die beiden Vektoren senkrecht zueinander sind ($\varphi = \pi/2$: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$), oder wenn die beiden Vektoren antiparallel zueinander sind ($\varphi = \pi$: $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = -ab$). Das Skalarprodukt findet häufig Verwendung zur Berechnung der Länge eines Vektors ($a^2 = \mathbf{a} \cdot \mathbf{a}$) oder zur Berechnung des Winkels zwischen zwei Vektoren ($\cos(\varphi) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} / (ab)$).

Kleine Übungsaufgabe: Die Bindungslänge in Methan, CH_4 , ist $r_e(\text{CH}) = 1,0870 \text{ \AA}$ im Gleichgewicht (Energiminimum der Molekülstruktur)¹². In einem Würfel der Kantenlänge $2a$ sind die Positionen der fünf Atomkerne (in kartesischen Koordinaten) $\text{C}(0, 0, 0)$, $\text{H}_1(a, a, a)$, $\text{H}_2(-a, a, -a)$, $\text{H}_3(-a, -a, a)$, $\text{H}_4(a, -a, -a)$. Wie ist a zu wählen, damit die richtige Bindungslänge herauskommt? Was ergibt sich für den HH-Abstand im Gleichgewicht, $d_e(\text{HH})$? Welchen Wert hat der Bindungswinkel im Gleichgewicht, $\varphi_e = \angle(\text{H}-\text{C}-\text{H})$?

Matrizen

Eine Matrix \mathbf{A} ist zunächst nichts weiter als ein rechteckiges Schema von Elementen $a_{ik} = (\mathbf{A})_{ik}$, die in m Zeilen und n Spalten angeordnet sind ($1 \leq i \leq m$, $1 \leq k \leq n$):

$$\mathbf{A} = (a_{ik}) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}.$$

Das Matricelement a_{ik} mit Zeilenindex i und Spaltenindex k steht in Zeile i in Spalte k der $(m \times n)$ -Matrix \mathbf{A} . Oft sind die Matricelemente einfach nur Zahlen (reell oder komplex), es können aber auch (reell- oder komplexwertige) Funktionen sein.

¹² D. R. Lide (Hrsg.): *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 87. Aufl. CRC Press, 2006, p. 9-38.

Transponierte Matrix

Die Transponierte \mathbf{A}^\top zu einer Matrix $\mathbf{A} = (a_{ik})$ entsteht aus dieser durch „Umklappen“ (Zeilen [Spalten] von \mathbf{A} werden zu Spalten [Zeilen] von \mathbf{A}^\top):

$$(\mathbf{A}^\top)_{ik} = (\mathbf{A})_{ki} = a_{ki}.$$

Es ist $(\mathbf{A}^\top)^\top = \mathbf{A}$.

Adjungierte Matrix

Die Adjungierte \mathbf{A}^\dagger zu einer Matrix $\mathbf{A} = (a_{ik})$ entsteht aus dieser durch Bilden der komplex-konjugierten und transponierten Matrix:

$$\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^\top)^* = (\mathbf{A}^*)^\top \quad \Leftrightarrow \quad (\mathbf{A}^\dagger)_{ik} = a_{ki}^*.$$

Es ist $(\mathbf{A}^\dagger)^\dagger = \mathbf{A}$.

Quadratische Matrix

Eine Matrix mit gleicher Zahl n von Zeilen und Spalten heisst n -reihige quadratische Matrix. Eine quadratische Matrix \mathbf{A} , die gleich ihrer Transponierten \mathbf{A}^\top ist ($\mathbf{A}^\top = \mathbf{A}$, $a_{ki} = a_{ik}$), heisst **symmetrisch**. Beispiel ($a, b, c \in \mathbb{R}$):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix} = \mathbf{A}^\top.$$

Eine quadratische Matrix \mathbf{A} , die gleich ihrer Adjungierten \mathbf{A}^\dagger ist ($\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$, $a_{ki}^* = a_{ik}$), heisst **selbstadjungiert** oder **hermitesch** (nach Charles Hermite, 1822–1901). Beispiel ($a, c, u, v \in \mathbb{R}$):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & u + i v \\ u - i v & c \end{pmatrix} = \mathbf{A}^\dagger.$$

Ein weiterer wichtiger Spezialfall quadratischer Matrizen sind die Diagonalmatrizen:

$$\mathbf{D} = \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}) = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Eine **Einheitsmatrix** \mathbf{E} ist eine Diagonalmatrix mit $a_{ii} = 1$ ($1 \leq i \leq n$).

Einreihige Matrizen

Dies sind Vektoren (in der Notation der geordneten n -Tupel):

$$\text{Spaltenvektor } ((n \times 1)\text{-Matrix}): \quad \underline{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = (a_1, a_2, \dots, a_n)^\top,$$

$$\text{Zeilenvektor } ((1 \times n)\text{-Matrix}): \quad \underline{a}^\top = (a_1, a_2, \dots, a_n) = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix}^\top.$$

Rechenregeln für Matrizen

Sofern diese Rechenregeln die Addition von Matrizen und deren Multiplikation mit einem Skalar erklären, sind sie völlig analog zu den oben genannten Rechenregeln für Vektoren (und in der Form von Spalten- oder Zeilenvektoren sind Vektoren, wie eben gesehen, ja auch nur eine spezielle Art von Matrizen). Beispiele für diese Rechenregeln sind:

► Existenz der Summe und Kommutativgesetz bzgl. Matrixaddition:

$$\mathbf{A}_{(m \times n)} + \mathbf{B}_{(m \times n)} = \mathbf{B}_{(m \times n)} + \mathbf{A}_{(m \times n)} = \mathbf{C}_{(m \times n)} \quad \Leftrightarrow \quad c_{ik} = (\mathbf{C})_{ik} = (\mathbf{A})_{ik} + (\mathbf{B})_{ik} = a_{ik} + b_{ik}.$$

► Existenz eines neutralen Elements bzgl. Matrixaddition (Nullmatrix):

$$\mathbf{A}_{(m \times n)} + \mathbf{O}_{(m \times n)} = \mathbf{A}_{(m \times n)}.$$

► Multiplikation mit einem Skalar:

$$\lambda \mathbf{A} = \lambda (a_{ik}) = (\lambda a_{ik}).$$

Deutlich komplizierter erscheint nun zunächst die **Multiplikation von Matrizen**. Diese ist nur dann definiert, wenn die miteinander zu multiplizierenden Matrizen miteinander *kompatibel* sind: Das Produkt einer $(m \times p)$ -Matrix \mathbf{A} mit einer $(p \times n)$ -Matrix \mathbf{B} ist eine $(m \times n)$ -Matrix \mathbf{C} , deren Elemente nach folgender Formel erhalten werden:

$$c_{ij} = (\mathbf{C})_{ij} = \sum_{k=1}^p (\mathbf{A})_{i\mathbf{k}} (\mathbf{B})_{\mathbf{k}j} = \sum_{k=1}^p a_{i\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}j} \quad (1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n).$$

$$\begin{pmatrix} \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{i\mathbf{1}} & a_{i\mathbf{2}} & \cdots & a_{i\mathbf{p}} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots & b_{\mathbf{1}j} & \vdots \\ \vdots & b_{\mathbf{2}j} & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & b_{\mathbf{p}j} & \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdots & \vdots & \cdots \\ \cdots & c_{ij} & \cdots \\ \cdots & \vdots & \cdots \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}_{(m \times \mathbf{p})} \quad \mathbf{B}_{(\mathbf{p} \times n)} = \mathbf{C}_{(m \times n)}$$

Beispiel: Multiplikation einer (2×2) -Matrix mit einer (2×3) -Matrix:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \cdot 1 + 2 \cdot 2 & 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 & 1 \cdot 0 + 2 \cdot (-1) \\ -1 \cdot 1 + 0 \cdot 2 & -1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 & -1 \cdot 0 + 0 \cdot (-1) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 5 & 1 & -2 \\ -1 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Die Matrixmultiplikation ist assoziativ $((\mathbf{A}\mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{B}\mathbf{C}))$, aber nicht kommutativ $(\mathbf{A}\mathbf{B} \neq \mathbf{B}\mathbf{A})$, wie das folgende Beispiel zeigt:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ebenfalls zu beachten ist, dass man aus $\mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{O}$ und $\mathbf{A} \neq \mathbf{O}$ nicht auf $\mathbf{B} = \mathbf{O}$ schliessen darf (Existenz von Nullteilern):

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

Für das Skalarprodukt von zwei Vektoren schreibt man nun:

$$\underline{a}^\top \underline{b} = (a_1, a_2, \dots, a_n) \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n = \sum_{k=1}^n a_k b_k.$$

Im Fall $n = 3$ reduziert sich dies auf die zuvor angegebene Form (s. o.). Es wird jetzt auch erkennbar, dass die Matrixmultiplikation $\mathbf{A} \mathbf{B} = \mathbf{C}$ nichts weiter erfordert als das Berechnen von Skalarprodukten zwischen Zeilenvektoren des linken Faktors \mathbf{A} mit Spaltenvektoren des rechten Faktors \mathbf{B} . Damit das richtig funktioniert muss die Zahl der Spalten von Matrix \mathbf{A} mit der Zahl der Zeilen von Matrix \mathbf{B} übereinstimmen.

Die Multiplikation einer n -reihigen quadratischen Matrix \mathbf{A} mit einem n -komponentigen Spaltenvektor \underline{x} ergibt wieder einen n -komponentigen Spaltenvektor \underline{x}' :

$$\mathbf{A} \underline{x} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \\ \vdots \\ x'_n \end{pmatrix} = \underline{x}'$$

Diese Matrix-Vektor-Gleichung fasst n Gleichungen — je eine für jede der n Komponenten des Vektors \underline{x}' — zusammen.

Spezialfälle der Matrix-Vektor-Multiplikation:

(1) Multiplikation mit einer Einheitsmatrix (Identitätsoperation oder Eins-Operation \hat{E}):

$$\mathbf{E} \underline{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \underline{x}.$$

(2) Projektion \hat{P} auf die x -Achse (*eindimensionale* Projektion in \mathbb{R}^3):

$$\mathbf{P} \underline{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Für Projektionsmatrizen gilt allgemein: $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P} \mathbf{P} = \mathbf{P}$. Projektionsmatrizen sind ausserdem hermitesch ($\mathbf{P}^\dagger = \mathbf{P}$). Manche Vektoren werden durch die Projektion auf den Nullvektor abgebildet:

$$\mathbf{P} \underline{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \underline{0}.$$

(3) Inversion \hat{I} am Ursprung (die Operation \hat{I} wird durch eine passende Matrix \mathbf{I} repräsentiert):

$$\mathbf{I} \underline{x} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_1 \\ -x_2 \\ -x_3 \end{pmatrix} = -\underline{x}.$$

(4) Rotation $\hat{R}(\phi)$ um die x -Achse mit Drehwinkel ϕ :

$$\mathbf{R}(\phi) \underline{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(\phi) & -\sin(\phi) \\ 0 & \sin(\phi) & \cos(\phi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \cos(\phi) x_2 - \sin(\phi) x_3 \\ \sin(\phi) x_2 + \cos(\phi) x_3 \end{pmatrix} = \underline{x}'.$$

Einige Elemente in der Drehmatrix $\mathbf{R}(\phi)$ sind Funktionen des Drehwinkels ϕ .

Drehung der kartesischen Einheitsvektoren um die x -Achse mit Drehwinkel $\phi = \pi/2$:

$$\hat{R}(\pi/2) \mathbf{i} = \mathbf{i}, \quad \hat{R}(\pi/2) \mathbf{j} = \mathbf{k}, \quad \hat{R}(\pi/2) \mathbf{k} = -\mathbf{j},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Kleine Übungsaufgabe: Ist die Matrix $\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix}$ eine Projektionsmatrix in \mathbb{R}^2 ? Für Fortgeschrittene: Wie lautet die allgemeine Form einer eindimensionalen Projektionsmatrix in \mathbb{R}^2 ?

Lineare Gleichungssysteme

Ein System linearer Gleichungen (oder: ein lineares Gleichungssystem, LGS) aus m Gleichungen für n Unbekannte x_k ($1 \leq k \leq n$) lässt sich auch als Matrix-Vektor-Gleichung $\mathbf{A}\underline{x} = \underline{b}$ schreiben. Dabei sind \mathbf{A} und b vorgegeben, also bekannt, und x ist gesucht.

$$\left. \begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \right.$$

Noch kompakter ist die Notation des LGS als erweitertes Koeffizientenschema (oder als erweiterte Koeffizientenmatrix) $(A \mid b)$:

$$\left\{ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{array} \right) \right\}$$

Dieses Schema ist ideal zum Ausarbeiten der Lösung eines LGS, denn (i) enthält es nur noch die zur Lösung *wesentlichen* Informationen (die Elemente der Matrix \mathbf{A} und des Vektors \underline{b}), und (ii) lassen sich alle notwendigen Operationen zur Lösung äusserst bequem daran ausführen.

Homogenes lineares Gleichungssystem: $b = 0$.

Ein homogenes LGS hat immer die (triviale) Lösung $\underline{x} = \underline{0}$. Existiert ausserdem auch eine Lösung $\underline{x} \neq \underline{0}$ des homogenen LGS, dann ist $\lambda \underline{x}$ ($\lambda \in \mathbb{R}$) ebenfalls Lösung dieses homogenen LGS.

Inhomogenes lineares Gleichungssystem: $b \neq 0$.

Rang einer Matrix

Der Rang einer $(m \times n)$ -Matrix \mathbf{A} , $\text{rg}(\mathbf{A})$, ist die Maximalzahl linear unabhängiger Zeilen- bzw. Spaltenvektoren ($\text{rg}(\mathbf{A}) \leq \min(m, n)$). Eine Entscheidung über die Lösbarkeit eines LGS $\mathbf{A}\underline{x} = \underline{b}$ (keine Lösung, oder eindeutige Lösung, oder unendlich viele Lösungen) gelingt mit der Kenntnis des Rangs der Matrix, $\text{rg}(\mathbf{A})$, sowie — im Falle eines inhomogenen LGS — des Rangs der erweiterten Koeffizientenmatrix, $\text{rg}(\mathbf{A} \mid \underline{b})$.

Gauss-Algorithmus: Systematisches Verfahren zur Lösung eines LGS $A\underline{x} = \underline{b}$ durch Umformung in ein äquivalentes, aber leichter lösbares LGS $\tilde{A}\underline{x} = \tilde{b}$ (z. B. ein LGS in Zeilenstufenform).

Beispiel zum Gauss-Algorithmus: LGS mit $m = 4$ Gleichungen für $n = 3$ Unbekannte:

$$\left. \begin{array}{rrrrrr} x_1 & - & x_2 & + & 2 & x_3 & = & 1 \\ x_1 & - & 2 & x_2 & - & x_3 & = & 2 \\ 3 & x_1 & - & x_2 & + & 5 & x_3 & = & 3 \\ -2 & x_1 & + & 2 & x_2 & + & 3 & x_3 & = & -4 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 \end{array} \right) \quad (1) \\ \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -2 & -1 & 2 \end{array} \right) \quad (2) \\ \left(\begin{array}{ccc|c} 3 & -1 & 5 & 3 \end{array} \right) \quad (3) \\ \left(\begin{array}{ccc|c} -2 & 2 & 3 & -4 \end{array} \right) \quad (4) \end{array} \right. \\ \Leftrightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 \\ \textcolor{red}{0} & -1 & -3 & 1 \\ \textcolor{red}{0} & 2 & -1 & 0 \\ \textcolor{red}{0} & 0 & 7 & -2 \end{array} \right) \begin{array}{l} (1) \\ (2') = (2) - (1) \\ (3') = (3) - 3(1) \\ (4') = (4) + 2(1) \end{array} \Leftrightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & \textcolor{red}{0} & -7 & 2 \\ 0 & 0 & 7 & -2 \end{array} \right) \begin{array}{l} (1) \\ (2') \\ (3'') = (3') + 2(2') \\ (4') \end{array}$$

$$\Leftrightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & -1 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & -7 & 2 \\ 0 & 0 & \textcolor{red}{0} & \textcolor{red}{0} \end{array} \right) \begin{array}{l} (1) \\ (2') \\ (3'') \\ (4'') = (4') + (3'') \end{array} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} 1. \text{ aus } (4''): \operatorname{rg}(\tilde{\mathbf{A}}) = \operatorname{rg}(\tilde{\mathbf{A}}|\tilde{\mathbf{b}}) = 3 \\ \leadsto \text{ das LGS hat eine eindeutige Lösung.} \\ 2. \text{ aus } (3''): x_3 = -2/7. \\ 3. \text{ aus } (2'): x_2 = -1/7. \\ 4. \text{ aus } (1): x_1 = 10/7. \end{array} \right.$$

Die Lösung dieses LGS ist also $\underline{x} = (10/7, -1/7, -2/7)^\top$.

Probe (durch Einsetzen in das ursprünglich gegebene LGS): ✓.