Gauß'sches Lösungsverfahren

Die Idee des Gaußschen Lösungsverfahrens ist:

Schritt 1 Durch elementare Zeilenumformung auf obere Dreiecksform bringen (Eliminationsverfahren)

$$\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & b_3 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & b_4 \end{array}\right) \longrightarrow \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & b_1 \\ 0 & a'_{22} & a'_{23} & a'_{24} & b'_2 \\ 0 & 0 & a'_{33} & a'_{34} & b'_3 \\ 0 & 0 & 0 & a'_{44} & b'_4 \end{array}\right)$$

Schritt 2 *von unten her* auflösen

Die rechte erweiterte Koeffizientenmatrix entspricht dem Gleichungssystem

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 &= b_1 \\ a'_{22}x_2 + a'_{23}x_3 + a'_{24}x_4 &= b'_2 \\ a'_{33}x_3 + a'_{34}x_4 &= b'_3 \\ a'_{44}x_4 &= b'_4 \end{aligned}$$

Das obige System kann nun ausgehend von der vierten Zeile direkt gelöst werden.

10.2 Homogene lineare Gleichungssysteme

Homogene lineare Gleichungssysteme besitzen entweder unendlich viele Lösungen oder aber der einzige Lösungsvektor ist der Nullvektor $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Beispiel 10.5

$$\begin{aligned} x_1 - 4x_2 + 2x_3 &= 0 \\ 2x_1 - 3x_2 - x_3 - 5x_4 &= 0 \\ 3x_1 - 7x_2 + x_3 - 5x_4 &= 0 \\ x_2 - x_3 - x_4 &= 0 \end{aligned}$$

(d. h. vier Gleichungen für vier Unbekannte)

Wir schreiben $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 2 & -3 & -1 & -5 \\ 3 & -7 & 1 & -5 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}$$

Im Falle eines homogenen Systems ist die erweiterte Koeffizientenmatrix nicht notwendig, da sowieso alle Komponenten $b_i = 0$ sind.

1. Durch Gaußsches Eliminationsverfahren auf Dreiecksform bringen: Erste Zeile übernehmen, restliche Zeilen so umformen, dass die erste Spalte = 0. Wir rechnen also

$$\begin{aligned} z_2 &\longrightarrow z_2 - 2z_1 \\ z_3 &\longrightarrow z_3 - 3z_1 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 2-2 & -3+8 & -1-4 & -5-0 \\ 3-3 & -7+12 & 1-6 & -5-0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

und erhalten

$$\begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 0 & 5 & -5 & -5 \\ 0 & 5 & -5 & -5 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Die Zeilen z_2, z_3 und z_4 sind äquivalent, denn rechnen wir

$$\begin{aligned} z_2 &\longrightarrow z_2/5 \\ z_3 &\longrightarrow z_3 - z_2 \\ z_4 &\longrightarrow 5z_4 - z_2 \end{aligned}$$

und erhalten

$$\begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Zwei Unbekannte können frei gewählt werden:

$$x_3 = \lambda_1 \quad \text{und} \quad x_4 = \lambda_2 \quad \text{wobei} \quad \lambda_1,\, \lambda_2 \in \mathbb{R}\,.$$

2. Rücksubstitution

$$\begin{aligned} z_2: \quad x_2 - x_3 - x_4 &= 0 \\ x_2 &= +x_3 + x_4 = \lambda_1 + \lambda_2 \\ z_1: \quad x_1 - 4x_2 + 2x_3 &= 0 \\ x_1 &= 4x_2 - 2x_3 \\ &= 4(\lambda_1 + \lambda_2) - 2\lambda_1 = 2\lambda_1 + 4\lambda_2 \end{aligned}$$

Die *allgemeine Lösung* des linearen Gleichungssystems lautet damit

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\lambda_1 + 4\lambda_2 \\ \lambda_1 + \lambda_2 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \lambda_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{v_1}} + \lambda_2 \underbrace{\begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{v_2}} \qquad (10.4)$$

oder

$$\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{v_1} + \lambda_2 \mathbf{v_2}$$

mit den *Lösungsvektoren* $\mathbf{v}_1$ und $\mathbf{v}_2$. Das lineare Gleichungssystem hat also unendlich viele Lösungen.

Eine *spezielle Lösung* des linearen Gleichungssystems erhält man für eine bestimmte Parameterwahl, z. B. für $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 1$ ist

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Probe

$$\mathbf{Ax} = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 2 & -3 & -1 & -5 \\ 3 & -7 & 1 & -5 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2-4+2+0 \\ 4-3-1+0 \\ 6-7+1+0 \\ 0+1-1+0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Beispiel 10.6

$$\begin{array}{rcl} x_1 + 2x_2 - 3x_3 & = & 0 \\ 2x_1 + 5x_2 + 2x_3 & = & 0 \\ 3x_1 - x_2 - 4x_3 & = & 0 \end{array} \qquad \rightarrow \mathbf{Ax} = 0$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 2 & 5 & 2 \\ 3 & -1 & -4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

1. Elimination

   Wir rechnen $z_2 - 2z_1$ und $z_3 - 3z_1$

   $$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 0 & 1 & 8 \\ 0 & -7 & 5 \end{pmatrix}$$

   mit $z_3 + 7z_2$ erhalten wir

   $$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -3 \\ 0 & 1 & 8 \\ 0 & 0 & 61 \end{pmatrix}$$

2. Rücksubstitution

$$\begin{aligned} 61x_3 &= 0 \\ x_2 + 8x_3 &= 0 \\ x_1 + 2x_2 - 3x_3 &= 0 \end{aligned} \qquad \Rightarrow \qquad \begin{aligned} x_3 &= 0 \\ x_2 &= 0 \\ x_1 &= 0 \end{aligned} \qquad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Für homogene Gleichungssysteme gilt im Allgemeinen:

- Existieren ebenso viele unabhängige Gleichungen wie Unbekannte, so gibt es genau eine Lösung $x_1 = x_2 \ldots x_n = 0$.
- Gibt es weniger Gleichungen als Unbekannte, so finden wir unendlich viele Lösungen.

Ist also ein homogenes lineares Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = 0$ mit m Gleichungen und n Unbekannten gegeben, so erhalten wir nach Elimination

$$m \left\{ \left(\overbrace{\begin{array}{ccccc} x & x & x & \cdots & x \\ 0 & x & x & \cdots & x \\ 0 & 0 & x & \cdots & x \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & x \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & & & & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}}^{n} \right) \right. \begin{array}{l} \left.\vphantom{\begin{array}{c}x\\x\\x\\x\end{array}}\right\} r \\ \left.\vphantom{\begin{array}{c}x\\x\\x\end{array}}\right\} m-r \end{array}$$

Die Zahl der von Null verschiedenen Zeilen wird als der *Rang* der Matrix $\mathbf{A}$ bezeichnet, d. h. hier ist Rang $\mathbf{A} = r$.

1. Rang $\mathbf{A} = n$
   Es gibt nur eine einzige Lösung $x_i = 0$

2. Rang $\mathbf{A} < n$
   Es gibt $l = (n - \text{Rang}\,\mathbf{A})$ freie Parameter $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_l \in \mathbb{R}$.
   Allgemeine Lösung: $\mathbf{x} = \lambda_1 \mathbf{v}_1 + \lambda_2 \mathbf{v}_2 + \ldots \lambda_l \mathbf{v}_l$.

   Spezielle Lösung ergeben sich für feste Werte von λ_i.

Beispiel 10.7 $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & -2 \\ 3 & -7 & -2 & 4 \\ 4 & 3 & 5 & 2 \end{pmatrix}$$

Da es drei Gleichungen und vier Unbekannte gibt, muß es von Null verschiedene Lösungen geben.

1. Elimination

   Mit $z_2 - 3z_1$ und $z_3 - 4z_1$ ergibt sich

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & -2 \\ 0 & -1 & -11 & 10 \\ 0 & 11 & -7 & 10 \end{pmatrix}$$

   und durch $z_3 + 11\, z_2$ finden wir

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & 3 & -2 \\ 0 & -1 & -11 & 10 \\ 0 & 0 & 128 & 120 \end{pmatrix}$$

   Für diese Matrix gilt: $\mathrm{Rang}\, \mathbf{A} = 3$, es gibt also $n - \mathrm{Rang}\, \mathbf{A} = 1$ freien Parameter, $x_4 = \lambda$.

2. Rücksubstitution

$$\begin{aligned}
128\, x_3 + 120\, x_4 &= 0 \\
16\, x_3 &= -15\, \lambda \\
x_3 &= -\frac{15}{16}\, \lambda \\
-x_2 + \frac{11 \cdot 15}{16}\, \lambda + 10\, \lambda &= 0 \\
x_2 &= \frac{11 \cdot 15 + 10 \cdot 16}{16}\, \lambda = \frac{325}{16} \lambda \\
x_1 - \frac{650}{16} \lambda - \frac{45}{16} \lambda - 2\lambda &= 0 \\
x_1 &= \frac{727}{16} \lambda
\end{aligned}$$

Also:

$$\mathbf{x} = \frac{\lambda}{16} \begin{pmatrix} 727 \\ 325 \\ -15 \end{pmatrix}$$

10.3 Inhomogene lineare Gleichungssysteme

Beispiel 10.8

$$\begin{aligned}
2x_1 + x_2 - 2x_3 &= 10 \\
3x_1 + 2x_2 + 2x_3 &= 1 \\
5x_1 + 4x_2 + 3x_3 &= 4
\end{aligned}$$

ergibt $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -2 \\ 3 & 2 & 2 \\ 5 & 4 & 3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ 4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

1. Elimination

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -2 & 10 \\ 3 & 2 & 2 & 1 \\ 5 & 4 & 3 & 4 \end{array}\right)$$

Mit $2z_2 - 3z_1$ und $2z_3 - 5z_1$ erhalten wir

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -2 & 10 \\ 0 & 1 & 10 & -28 \\ 0 & 3 & 16 & -42 \end{array}\right)$$

und nach $z_3 - 3z_2$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & -2 & 10 \\ 0 & 1 & 10 & -28 \\ 0 & 0 & -14 & 42 \end{array}\right)$$

2. Rücksubstitution

$$\begin{array}{rcl} -14x_3 = 42 & \rightarrow & x_3 = -\frac{42}{14} = -3 \\ x_2 + 10x_3 = -28 & \rightarrow & x_2 = 30 - 28 = 2 \\ 2x_1 + x_2 - 2x_3 = 10 & \rightarrow & x_1 = \frac{1}{2}(-2 - 6 + 10) = 1 \end{array}$$

Daraus folgt als einzige Lösung

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Wenn also der Rang $\mathbf{A}$ der Anzahl der Unbekannten n entspricht, gibt es genau *eine* Lösung.

Beispiel 10.9

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 5 & 6 & 0 \\ 7 & 8 & 9 & 4 \end{array}\right)$$

$4z_1 - z_2$ und $7z_1 - z_3$ führt zu

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 3 & 6 & 16 \\ 0 & 6 & 12 & 24 \end{array}\right)$$

und mit $z_3 - 2z_2$ erhalten wir

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 3 & 6 & 16 \\ 0 & 0 & 0 & -8 \end{array}\right)$$

In Zeile 3 ergibt sich ein *Widerspruch*: $0 = -8$.

Es existiert also *keine* Lösung.

Um ein inhomogenes lineares Gleichungssystem zu lösen, wenden wir demnach folgende Schritte an:

1. Elimination
   Wir bringen das System in die Dreiecksform

2. Rücksubstitution
   Wir bilden die linearen Gleichungen und lösen nach den Variablen auf.

$$\text{Lösbarkeit} \quad \rightarrow \quad \begin{cases} \text{eine Lösung} & \text{Rang}\,\mathbf{A} = n \\ \text{keine Lösung} & \text{Rang}\,\mathbf{A} = r < n \quad \text{und} \quad \text{Rang}\,\mathbf{A}|\mathbf{b} > r \\ \text{unend. viele Lsgen.} & \text{Rang}\,\mathbf{A} = r < n \quad \text{und} \quad \text{Rang}\,\mathbf{A}|\mathbf{b} = r \end{cases}$$

10.4 Zusammenhang zwischen homogenen und inhomogenen linearen Gleichungssystemen

Sei $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 2 & -3 & -1 & -5 \\ 3 & -7 & 1 & -5 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Wie oben gezeigt kann man für $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ (homogener Fall) die Matrix umformen in

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -4 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

und wir erhalten als allgemeine homogene Lösung

$$\mathbf{x_H} = \lambda_1 \mathbf{v_1} + \lambda_2 \mathbf{v_2}$$

mit

$$\mathbf{v_1} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \text{und} \qquad \mathbf{v_2} = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Für $\mathbf{b} \neq \mathbf{0}$ starten wir mit

$$(\mathbf{A}|\mathbf{b}) = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -4 & 2 & 0 & b_1 \\ 2 & -3 & -1 & -5 & b_2 \\ 3 & -7 & 1 & -5 & b_3 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & b_4 \end{array}\right)$$

woraus entsteht

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -4 & 2 & 0 & b_1 \\ 0 & 5 & -5 & -5 & b_2 - 2b_1 \\ 0 & 5 & -5 & -5 & b_3 - 3b_1 \\ 0 & 5 & -5 & -5 & 5b_4 \end{array}\right)$$

Dies ist lösbar, wenn

$$b_2 - 2b_1 = b_3 - 3b_1 = 5b_4$$

Nehmen wir zum Beispiel an, dass $b_1 = 0$, so gilt $b_2 = b_3 = 5b_4 = 1$, also

$$\left(\begin{array}{cccc|c} 1 & -4 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 & 1/5 \end{array}\right)$$

Mit $x_3 = \lambda_1$ und $x_4 = \lambda_2$ erhalten wir nun

$$\begin{aligned} x_2 &= 1/5 - x_3 - x_4 \\ &= 1/5 + \lambda_1 + \lambda_2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} x_1 &= 0 + 4x_2 - 2x_3 \\ &= 4/5 + 4\lambda_1 + 4\lambda_2 - 2\lambda_1 \end{aligned}$$

Der Lösungsvektor $\mathbf{x_{IH}}$ lautet

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4/5 + 2\lambda_1 + 4\lambda_2 \\ 1/5 + \lambda_1 + \lambda_2 \\ \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 4/5 \\ 1/5 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{x_S}} + \underbrace{\lambda_1 \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda_2 \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{x_H}}$$

Vergleichen wir das Ergebnis mit der homogenen Lösung, so stellen wir fest

$\mathbf{x_{IH}}$	$=$	$\mathbf{x_S}$	$+$	$\mathbf{x_H}$
allgemeine inhomogene Lösung		spezielle inhomogene Lösung		allgemeine homogene Lösung

Dies ist in Analogie zu den Differentialgleichungen (siehe Kapitel 7) (DGL) zu sehen, wo ebenfalls die allgemeine Lösung der inhomogenen DGL durch die allgemeine Lösung der homogenen DGL und einer speziellen Lösung der inhomogenen DGL gegeben war.

10.5 Gauß-Jordan-Verfahren zur Berechnung der Inversen

Zu lösen ist das Problem

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{E}$$

Beschreibt man die Matrizen $\mathbf{A}^{-1}$ und $\mathbf{E}$ in der Spaltendarstellung, also $\mathbf{A}^{-1} = (\mathbf{s}_1, \ldots, \mathbf{s}_n)$ und $\mathbf{E} = (\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n)$, so kann man dieses Problem als n lineare Gleichungssysteme

$$\mathbf{A}\mathbf{s}_i = \mathbf{e}_i \qquad i = 1, \ldots, n$$

betrachten, die man unabhängig voneinander lösen kann. Hierbei verwendet man in der Regel eine Erweiterung des Gauß Verfahrens: *Das Gauß–Jordan Verfahren.* Im Unterschied zum Gauß Verfahren bringt man die Matrix nicht auf eine Dreiecksform, sondern auf die Form einer Einheitsmatrix (soweit möglich). Zusätzlich behandelt man alle n Gleichungssysteme simultan, man betrachtet also die erweiterte Koeffizientenmatrix $(\mathbf{A}|\mathbf{e}_1, \ldots, \mathbf{e}_n)$. Dies führt auf den Ansatz:

$$(\mathbf{A}|\,\mathbf{E}) \longrightarrow (\mathbf{E}|\,\mathbf{B})$$

mit $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$.

Beispiel 10.10

$$\begin{array}{ccc|cccl}
 & A & & & E & & \\
\hline
1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 & \\
2 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & \\
1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 1 & \\
 & & & & & & \\
1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 & \\
0 & -3 & -6 & -2 & 1 & 0 & z_2 - 2z_1 \\
0 & -2 & -1 & -1 & 0 & 1 & z_3 - z_1 \\
 & & & & & & \\
1 & 2 & 3 & 1 & 0 & 0 & \\
0 & -3 & -6 & -2 & 1 & 0 & \\
0 & 0 & 3 & \frac{1}{3} & -\frac{2}{3} & 1 & z_3 - \frac{2}{3}z_2 \\
 & & & & & & \\
1 & 2 & 0 & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} & -1 & z_1 - z_3 \\
0 & 1 & 0 & \frac{4}{9} & \frac{1}{9} & -\frac{2}{3} & -\frac{1}{9}(z_2 - 2z_3) \\
0 & 0 & 1 & \frac{1}{9} & -\frac{2}{9} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{9}z_3 \\
 & & & & & & \\
1 & 0 & 0 & -\frac{2}{9} & \frac{4}{9} & \frac{1}{3} & z_1 - 2z_2 \\
0 & 1 & 0 & \frac{4}{9} & \frac{1}{9} & -\frac{2}{3} & \\
0 & 0 & 1 & \frac{1}{9} & -\frac{2}{9} & \frac{1}{3} &
\end{array}$$

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{9}\begin{pmatrix} -2 & 4 & 3 \\ 4 & 1 & -6 \\ 1 & -2 & 3 \end{pmatrix}$$

10.6 Die Determinante einer Matrix

Definition 10.4 Jeder $n \times n$-Matrix $\mathbf{A}$ kann eine Zahl, die sogenannte (n-reihige) *Determinante* $\det\mathbf{A}$ zugeordnet werden

$$\det \mathbf{A} = |\,\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

Die Determinante ist ein Maß für die lineare Abhängigkeit der Spalten– bzw. der Zeilenvektoren der Matrix.

Betrachten wir den Fall einer 2×2-Matrix mit $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$. Sind die Spaltenvektoren von $\mathbf{A}$ linear abhängig, so gilt

$$\begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \end{pmatrix} \qquad \text{mit} \quad \alpha \neq 0 \ .$$

Daraus folgt

$$\begin{array}{l} a_{11} = \alpha a_{12} \\ a_{21} = \alpha a_{22} \end{array} \quad \Rightarrow \quad \frac{a_{11}}{a_{21}} = \frac{a_{12}}{a_{22}} \quad \Rightarrow \quad a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = 0$$

Dies ist die Determinante der Matrix $\mathbf{A}$

$$\boxed{\det \mathbf{A} = \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} := a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}}$$

Die Determinante ist also so konstruiert, dass $\det \mathbf{A} = 0$ bedeutet, dass die Zeilen von $\mathbf{A}$ linear abhängig sind.

Analog testet in 3 Dimensionen das Spatprodukt $\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \times \mathbf{z})$ die lineare Abhängigkeit von drei Vektoren $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$ und $\mathbf{z}$. Das Spatprodukt der Spaltenvektoren $\mathbf{v}_1$, $\mathbf{v}_2$ und $\mathbf{v}_3$ einer 3×3 Matrix ist

$$a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{32}a_{23}a_{11} - a_{33}a_{21}a_{12}$$

und somit ist die Determinante einer 3×3 Matrix

$$\boxed{\det(\mathbf{A}) = a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{31}a_{22}a_{13} - a_{32}a_{23}a_{11} - a_{33}a_{21}a_{12}} \ .$$

Für allgemeine $n \times n$ Matrizen ist diese geometrische Interpretation schwieriger aber gültig. In der Praxis verwendet man eine *rekursive Definition* der Determinante:

$n = 1$:

$$\mathbf{A} = (a_{11}) \qquad \det(\mathbf{A}) := a_{11}$$

$n \geq 2$: Entwicklung nach der ersten Spalte

$$\det(\mathbf{A}) := a_{11}\det(\mathbf{A}_{11}) - a_{21}\det(\mathbf{A}_{21}) + - \ldots + (-1)^{n+1} a_{n1}\det(\mathbf{A}_{n1})$$

wobei $\mathbf{A}_{i1}$ die $(n-1)\times(n-1)$-Matrix bezeichnet, die durch Streichen der ersten Spalte und der i-ten Zeile entsteht. Die Determinante kann nach jeder beliebigen Zeile oder Spalte entwickelt werden. Allgemeiner erhält man, wenn nach der i–ten Spalte entwickelt wird:

$$\det(\mathbf{A}) = \sum_{j=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ji}\det(\mathbf{A}_{ji})$$

Dieser Schritt wird nun rekursiv so oft angewendet, bis die resultierenden Matrizen $\mathbf{A}_{ij}$ die Größe $n = 1$ oder $n = 2$ haben.

Beispiel 10.11 Entwicklung einer allgemeinen 3×3 Matrix nach der ersten Spalte

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{A}) &= a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{21}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{31}\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \\ &= a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{32}a_{23}) - a_{21}(a_{12}a_{33} - a_{32}a_{13}) + a_{31}(a_{12}a_{23} - a_{22}a_{13}) \end{aligned}$$

Beispiel 10.12 Merkregel für 3×3 Matrizen: *Die Sarrus–Regel*

$$\begin{array}{cccccccc} a_{11} \oplus & & a_{12} \oplus & & a_{13} \oplus & & a_{11} & & a_{12} \\ & \diagdown & & \times & & \times & & \diagup & \\ a_{21} & & a_{22} & & a_{23} & & a_{21} & & a_{22} \\ & \diagup & & \times & & \times & & \diagdown & \\ a_{31} \ominus & & a_{32} \ominus & & a_{33} \ominus & & a_{31} & & a_{32} \end{array}$$

<u>Vorsicht:</u> Diese Regel kann nicht auf $n \times n$ Matrizen mit $n \geq 4$ angewendet werden!

Beispiel 10.13 Obere Dreiecksmatrix

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$= a_{11} \det \begin{pmatrix} a_{22} & \dots & a_{2n} \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = a_{11} a_{22} \det \begin{pmatrix} a_{33} & \dots & a_{3n} \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \dots =$$

$$= a_{11}\, a_{22}\, \dots\, a_{nn}$$

Hieraus folgt sofort, dass gilt

$$\det(\mathbf{E}) = 1$$

und

$$\det(\alpha \mathbf{E}) = \alpha^n$$

Rechenregeln

1. *Die Determinante ist linear in jeder Zeile (Spalte)*, das heißt

$$\det \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \\ \alpha\, \mathbf{z}_i \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n \end{pmatrix} = \alpha \det \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{z}_i \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n \end{pmatrix}$$

und

$$\det \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{z}_i + \mathbf{z}'_i \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{z}_i \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n \end{pmatrix} + \det \begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{z}'_i \\ \vdots \\ \mathbf{z}_n \end{pmatrix}$$

2. *Die Determinante ist alternierend*, das heißt
entsteht $\tilde{\mathbf{A}}$ aus $\mathbf{A}$ durch Vertauschen zweier Zeilen (Spalten), dann gilt

$$\boxed{\det(\tilde{\mathbf{A}}) = -\det(\mathbf{A})}$$

3. Enthält $\mathbf{A}$ zwei gleiche Zeilen (Spalten), so ist

$$\det(\mathbf{A}) = -\det(\mathbf{A}) = 0 \; .$$

4. Die Determinante ändert sich nicht bei elementaren Zeilen– bzw. Spalten–Umformungen, um etwa die Matrix auf Dreiecksform zu bringen. Denn ersetzt man etwa die erste Zeile durch die Summe aus erster und zweiter Zeile so gilt

$$\det\begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 + \mathbf{z}_2 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} + \det\begin{pmatrix} \mathbf{z}_2 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \det\begin{pmatrix} \mathbf{z}_1 \\ \mathbf{z}_2 \\ \vdots \end{pmatrix} + 0$$

5.
$$\det(\mathbf{A}^T) = \det(\mathbf{A})$$

6.
$$\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A}) \cdot \det(\mathbf{B})$$

7. Wenn $\mathbf{A}^{-1}$ existiert dann

$$1 = \det(\mathbf{E}) = \det(\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{A}^{-1})$$

$$\Rightarrow \quad \det(\mathbf{A}^{-1}) = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}$$

mit $\det(\mathbf{A}) \neq 0$.

Folgende Aussagen über die $n \times n$-Matrix sind also äquivalent

- $\mathbf{A}$ ist invertierbar
- $\det \mathbf{A} \neq 0$
- Das Lineare Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ hat eine eindeutige Lösung:
  Für $\mathbf{b} = \mathbf{0}$ ist $\mathbf{x} = 0$.
- Rang $\mathbf{A} = n$

Anwendung der Determinante

- Matrixinvertierung
  Sei $S_{ij} = (-1)^{i+j}|\mathbf{A}_{ij}|$, wobei $|\mathbf{A}_{ij}|$ die Determinante der Matrix ist, die aus $\mathbf{A}$ durch Streichen der i–ten Zeile und der j–ten Spalte entsteht. Bilde die Matrix

$$\tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & \dots & S_{1n} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ S_{n1} & S_{n2} & \dots & S_{nn} \end{pmatrix}$$

  und damit das Produkt $\tilde{\mathbf{A}}^T\mathbf{A}$. Dies ergibt

$$(\tilde{\mathbf{A}}^T\mathbf{A})_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (\tilde{\mathbf{A}}^T)_{ik}\mathbf{A}_{kj} = \sum_{k=1}^{n} a_{kj}\,(-1)^{i+k}|\mathbf{A}_{ki}|$$

  Die Summe auf der rechten Seite ist aber gerade die Entwicklung der Determinante der Matrix, die sich dadurch ergibt, dass man die i–te Spalte von $\mathbf{A}$ durch die j–te Spalte von $\mathbf{A}$ ersetzt, also

$$(\tilde{\mathbf{A}}^T\mathbf{A})_{ij} = \det(\mathbf{a}_1, \dots, \overset{i\text{–te Spalte}}{\mathbf{a}_j}, \dots, \mathbf{a}_n) = \det(\mathbf{A}^*)\ .$$

  Ist nun $i \neq j$, so enthält $\mathbf{A}^*$ zweimal die gleiche Spalte. Und somit ist die Determinante Null. Ist dagegen $i = j$, so ist $\mathbf{A}^* = \mathbf{A}$ und somit $\det(\mathbf{A}^*) = \det(\mathbf{A})$. Es gilt also

$$(\tilde{\mathbf{A}}^T\mathbf{A})_{ij} = \det(\mathbf{A})\delta_{ij} \quad \text{oder} \quad \tilde{\mathbf{A}}^T\mathbf{A} = \det(\mathbf{A})\mathbf{E}$$

  und somit folgt sofort

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}\tilde{\mathbf{A}}^T\ .$$

  Damit sieht man auch, dass eine Matrix nur dann invertierbar ist, wenn ihre Determinante ungleich Null ist.

- Cramersche Regel
  Sei $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ ein inhomogenes $n \times n$ lineares Gleichungssystem. Angenommen $\det(\mathbf{A}) \neq 0$, dann ist die Lösung

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}\ .$$

  Die i–te Komponente von $\mathbf{x}$ ist dann

$$x_i = \sum_{j=1}^{n} (\mathbf{A}^{-1})_{ij}b_j = \frac{1}{\det(\mathbf{A})}\sum_{j=1}^{n} b_j(-1)^{i+j}|\mathbf{A}_{ji}|$$

Wieder ist die letzte Summe der rechten Seite eine Determinantenentwicklung. Und zwar die Entwicklung der Matrix, die aus $\mathbf{A}$ durch Ersetzung der i–ten Spalte durch den Vektor $\mathbf{b}$ entsteht, also die Determinante

$$\det(\mathbf{a}_1, \ldots, \overset{i\text{–te Spalte}}{\mathbf{b}}, \ldots, \mathbf{a}_n) \; .$$

Damit ergibt sich sofort

$$x_i = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \det(\mathbf{a}_1, \ldots, \overset{i\text{–te Spalte}}{\mathbf{b}}, \ldots, \mathbf{a}_n) \; .$$

Dies ist die Cramer'sche Regel.

- Vektorprodukt
  Sei

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad \text{so ist } \mathbf{a}\times\mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_2b_3 - a_3b_2 \\ a_3b_1 - a_1b_3 \\ a_1b_2 - a_2b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{vmatrix} a_2 & b_2 \\ a_3 & b_3 \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_3 & b_3 \\ a_1 & b_1 \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix} \end{pmatrix}$$

- Slaterdeterminante
  Nach dem Pauli Prinzip muss die Gesamtwellenfunktion antisymmetrisch bezüglich des Austauschs von zwei beliebigen Elektronen sein. Betrachten wir beispielsweise ein System mit zwei Elektronen „1,2“, so muss gelten

$$\Psi(1,2) = -\Psi(2,1) \tag{10.5}$$

Verteilen wir zwei Elektronen auf 2 Orbitale α und β, so ist der einfachste Ansatz für die Gesamtwellenfunktion

$$\Psi(1,2) = \alpha(1)\beta(2) \neq -\Psi(2,1) = -\alpha(2)\beta(1) \; .$$

Um die Antisymmetriebedingung (10.5) zu erfüllen, schreiben wir

$$\begin{aligned} \Psi(1,2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha(1)\beta(2) - \alpha(2)\beta(1)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \alpha(1) & \beta(1) \\ \alpha(2) & \beta(2) \end{pmatrix} = -\Psi(2,1) \end{aligned}$$

Die Determinante erlaubt uns also aus Orbitalen antisymmetrische Wellenfunktionen zu konstruieren; sie heißt *Slaterdeterminante.*
Für gleiche Orbitale $\alpha = \beta$ erhalten wir das *Pauli Auschlussprinzip*

$$\Psi = (\alpha(1)\,\alpha(2) - \alpha(2)\,\alpha(1)) = 0$$

Sollen N Elektronen auf N Orbitale α_i verteilt werden, so erhält man für die Slaterdeterminante

$$\Psi(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} \alpha_1(1) & \alpha_2(1) & \ldots & \alpha_{N-1}(1) & \alpha_N(1) \\ \alpha_1(2) & \alpha_2(2) & \ldots & \alpha_{N-1}(2) & \alpha_N(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_1(N) & \alpha_2(N) & \ldots & \alpha_{N-1}(N) & \alpha_N(N) \end{pmatrix}$$

wobei der Term $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ ein Normierungsfaktor ist, der sicherstellt, dass $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2\,dx = 1$.