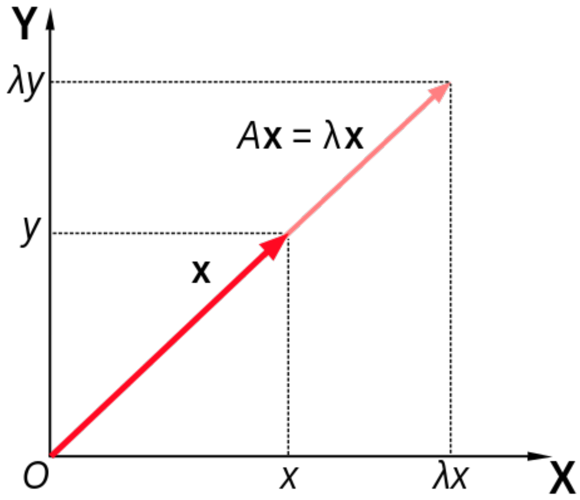
Universität
Konstanz

Mathematik II
für Chemie, Life Science und Nanoscience

Vorlesung 7: Eigenwerte und Eigenvektoren (Kap 17, Teil 1)

Dr. Stefan Frei, 15.06.2020

Definition



Quelle: wikipedia.org, Autor L.A.Lantonov

Es sei $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ eine quadratische Matrix. Ein $\lambda \in \mathbb{C}$ heißt Eigenwert von A, wenn es einen Eigenvektor $\vec{x} \in \mathbb{C}^n \setminus \{\vec{0}\}$ gibt mit

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x}.$$

Anmerkungen:

1. Eigenwerte und Eigenvektoren sind nur für quadratische Matrizen definiert.
2. Der Nullvektor ist **nie** ein Eigenvektor.
3. Eine reelle Matrix kann komplexe Eigenwerte und Eigenvektoren haben .

Bedeutung von Eigenwerten

- Wichtige, charakterisierende Eigenschaft von Matrizen (linearen Abbildungen)
- Lösung von Systemen von Differentialgleichungen (Kap. 18)
- Extrema im $\mathbb{R}^n$ (Definitheit der Hesse-Matrix)
- Viele Anwendungen in der physikalischen Chemie, ...

Beispiel 1

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$$

- $\lambda = -1$ ist ein Eigenwert und $\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}$ ein zugehöriger Eigenvektor, denn

$$A\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = -1 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \lambda\vec{x} \quad .$$

- Auch jeder Vektor $\vec{y} = c \cdot \vec{x}$ mit einer Konstante $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ ist ein Eigenvektor zu $\lambda = -1$

$$A\vec{y} = cA\vec{x} = c\lambda\vec{x} = \lambda\vec{y}$$

- Auch $\lambda = 3$ ist ein Eigenwert und $\vec{x} = c \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$ sind die zugehörigen Eigenvektoren:

$$A\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 6 \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \lambda\vec{x} \quad .$$

Beispiel 2

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

- $\lambda_1 = i$ ist ein Eigenwert und $\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ ein zugehöriger Eigenvektor, denn

$$A\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \\ -1 \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \lambda_1 \vec{x}_1$$

- $\lambda_2 = -i$ ist ein Eigenwert und $\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ ein zugehöriger Eigenvektor, denn

$$A\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ -1 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix} = \lambda_2 \vec{x}_2$$

- $c\vec{x}_1$ und $c\vec{x}_2$ (mit $c \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$) sind weitere Eigenvektoren zu λ_1 bzw. λ_2

Diagonalmatrizen

Eine Diagonalmatrix

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix}$$

hat die Eigenwerte $\lambda_i = a_{ii}$ $(i = 1, \ldots, n)$.

Zu λ_i ist $\vec{e}_i$ (natürlicher Einheitsvektor) ein Eigenvektor:

$$A\vec{e}_i = a_{ii}\vec{e}_i.$$

Eigenraum

Die Menge aller Eigenvektoren zum EW λ bildet zusammen mit dem Nullvektor einen linearen Teilraum von $\mathbb{C}^n$. Diesen nennt man den Eigenraum von A zum EW λ und bezeichnet ihn mit $\mathrm{eig}(A, \lambda)$.

Beispiel: (vgl. oben) Die Matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$ hat die Eigenwerte $\lambda_1 = -1$ und $\lambda_2 = 3$ und die zugehörigen Eigenvektoren

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \text{ (zu } \lambda_1\text{)} \qquad \text{und} \qquad \vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \text{ (zu } \lambda_2\text{)}$$

Es gilt

$$\mathrm{eig}(A, -1) = \mathrm{span}\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix}\right\}, \qquad \mathrm{eig}(A, 3) = \mathrm{span}\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}\right\}.$$

Beide Eigenräume haben die Dimension 1.

17.2: Berechnung von Eigenwerten

Wir suchen $\lambda \in \mathbb{C}$ so, dass es einen Vektor $\vec{x} \neq 0$ gibt mit

$$A\vec{x} \;=\; \lambda\vec{x}.$$

- Äquivalent dazu ist, dass

  $$(A - \lambda I)\vec{x} \;= \vec{0}$$

  für ein $\vec{x} \neq 0$ mit der $n \times n$-Einheitsmatrix I
- Solch ein $\vec{x}$ gibt es genau dann, wenn die Matrix $A - \lambda I$ keinen Vollrang hat, d.h.

  $$\det(A - \lambda I) = 0$$

Das charakteristische Polynom

Es seien $A \in \mathbb{K}^{n \times n}$ und I die $n \times n$-Einheitsmatrix. Dann heißt

$$p(\lambda) \ := \ p_A(\lambda) \ := \ \det(A - \lambda I)$$

das charakteristische Polynom von A. $p_A(\lambda)$ ist ein Polynom vom Grad n.

Beispiel: Es sei

$$A \ = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -3 & -2 & 3 \\ -2 & -2 & 3 \end{pmatrix} \quad .$$

Dann ist das charakteristische Polynom gegeben durch

$$p_A(\lambda) \ = \begin{vmatrix} -\lambda & -1 & 1 \\ -3 & -2-\lambda & 3 \\ -2 & -2 & 3-\lambda \end{vmatrix} = \ -\lambda^3 + \lambda^2 + \lambda - 1 \ = \ -(\lambda+1)(\lambda-1)^2 \, .$$

Nullstellen des charakteristischen Polynoms

Die Nullstellen des charakteristischen Polynoms sind die Eigenwerte von A:

$$\lambda \in \mathbb{C} \text{ Nullstelle von } p_A(\lambda) \;\Leftrightarrow\; \lambda \text{ Eigenwert von } A \quad .$$

- **Im obigen Beispiel**: A hat 2 Eigenwerte $\lambda_1 = -1$ und $\lambda_2 = 1$

Nach dem **Fundamentalsatz der Algebra** zerfällt das charakteristische Polynom $p_A(t)$ über $\mathbb{C}$ in Linearfaktoren:

$$p_A(\lambda) \;=\; (-1)^n(\lambda - \lambda_1)^{j_1} \cdots (\lambda - \lambda_k)^{j_k} \quad \text{mit } \lambda_i \in \mathbb{C} \text{ und } j_1 + \cdots + j_k = n \quad .$$

$\rightarrow \lambda_1, \ldots, \lambda_k$ sind die Eigenwerte von A.

- Es gibt höchstens n verschiedene Eigenwerte
- Der Exponent j_i heißt die algebraische Vielfachheit des Eigenwertes λ_i.

Berechnung der Eigenräume

Zu einem Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ bekommt man den zugehörigen Eigenraum $\mathrm{eig}(A, \lambda)$ durch Lösen des homogenen linearen Gleichungssystems

$$(A - \lambda I)\vec{x} \;=\; 0.$$

Die Dimension des Eigenraums

$$\dim(\mathrm{eig}(A, \lambda) \geq 1$$

heißt die geometrische Vielfachheit des Eigenwerts λ.

Es gilt

$$\textbf{geometrische Vielfachheit} \;\leq\; \textbf{algebraische Vielfachheit}\,.$$

Beispiel 1

Die obige Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ -3 & -2 & 3 \\ -2 & -2 & 3 \end{pmatrix}$$

hat die Eigenwerte $\lambda_1 = -1$ und $\lambda_2 = 1$.

Für den Eigenraum zu λ_1 muss gelten

$$(A - \lambda_1 I)\vec{x} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -3 & -1 & 3 \\ -2 & -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad .$$

Beispiel 1 (fortgesetzt)

Gauß-Elimination liefert

$$
\begin{array}{rrr|r}
1 & -1 & 1 & 0 \\
-3 & -1 & 3 & 0 \\
-2 & -2 & 4 & 0 \\
\hline
1 & -1 & 1 & 0 \\
0 & -4 & 6 & 0 \\
0 & -4 & 6 & 0 \\
\hline
1 & -1 & 1 & 0 \\
0 & -4 & 6 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0
\end{array}
$$

Wähle $x_3 = c$ beliebig. Dann ergibt sich $x_2 = \frac{3}{2}c$ und $x_1 = \frac{1}{2}c$, also

$$\operatorname{eig}(A, -1) = \operatorname{span}\left\{\begin{pmatrix} 1/2 \\ 3/2 \\ 1 \end{pmatrix}\right\} = \operatorname{span}\left\{\begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}\right\} .$$

Beispiel 1 (fortgesetzt)

Entsprechend erhält man für $\lambda_2 = 1$

$$
\begin{array}{rrr|r}
-1 & -1 & 1 & 0 \\
-3 & -3 & 3 & 0 \\
-2 & -2 & 2 & 0 \\
\hline
-1 & -1 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0
\end{array}
$$

Wähle x_2 und x_3 beliebig, dann ist $x_1 = -x_2 + x_3$. Somit folgt

$$
\text{eig}(A, 1) = \text{span}\left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} .
$$

Dieser Eigenwert hat die geometrische Vielfachheit 2.

Beispiel 1 (fortgesetzt)

Fazit: (n=3)

Eigenwert	geom. Vielfachheit	algebr. Vielfachheit
$\lambda_1 = -1$	1	1
$\lambda_2 = 1$	2	2

- Die algebraischen Vielfachheiten addieren sich immer zu n (Fundamentalsatz der Algebra)
- In diesem Beispiel addieren sich auch die geometrischen Vielfachheiten zu n (aber: Das gilt nicht immer)
- Die Eigenräume zu verschiedenen Eigenwerten sind hier (und immer) disjunkt (die Eigenvektoren zu verschiedenen EW sind linear unabhängig).
- Ist die geometrische Vielfachheit $= n$, so kann man eine Basis des $\mathbb{K}^n$ aus Eigenvektoren bilden, indem man in jedem Eigenraum eine Basis auswählt und diese kombiniert

Beispiel 2

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

- Charakteristisches Polynom $p_B(\lambda) = (2-\lambda)^3$
- Damit ist $\lambda = 2$ der einzige Eigenwert von B mit der algebraischen Vielfachheit 3
- Für den zugehörigen Eigenraum ergibt sich

  $$(B - \lambda I)\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

  Daraus folgt sofort $x_1 = x_2 = 0$ und x_3 beliebig, also

  $$\operatorname{eig}(B, 2) = \operatorname{span}\left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}.$$

- Die geometrische Vielfachheit ist 1 und damit kleiner als die algebraische Vielfachheit

Eigenschaften

- **Zusammenhang mit der Determinante**: Seien $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ die EW von A, wobei mehrfache Eigenwerte mehrfach auftreten. Dann gilt

$$\det(A) = \lambda_1 \cdot \ldots \cdot \lambda_n$$

- Es folgt

$$\lambda = 0 \text{ ist EW von } A \;\Leftrightarrow\; \det(A) = 0 \;\Leftrightarrow\; A \text{ ist singulär}$$

- **Zusammenhang mit der Spur**: Es gilt

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i$$

Eigenwerte der Inversen

Es seien A regulär und $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ die Eigenwerte von A. Dann hat A^{-1} die Eigenwerte

$$\frac{1}{\lambda_1}, \ldots, \frac{1}{\lambda_k}$$

mit den selben Eigenvektoren.

Beweis: Sei λ ein EW von A und $\vec{x}$ ein zugehöriger EV. Da A regulär ist, gilt $\lambda \neq 0$. Somit erhalten wir

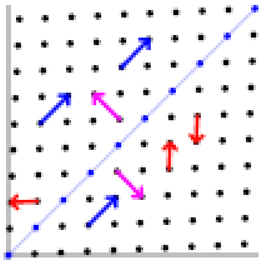
$$\begin{aligned} A\vec{x} &= \lambda\vec{x} \\ \Leftrightarrow \ \vec{x} &= A^{-1}(\lambda\vec{x}) = \lambda A^{-1}\vec{x} \\ \Leftrightarrow \ \frac{1}{\lambda}\vec{x} &= A^{-1}\vec{x} \quad . \end{aligned}$$

Geometrische Bedeutung der Eigenvektoren

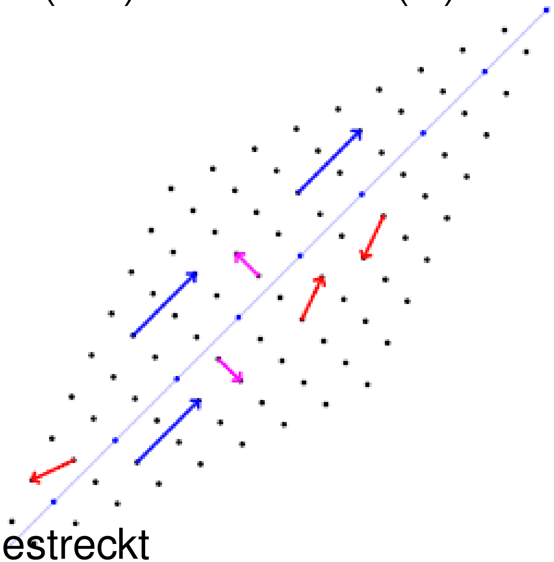
Beispiel

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

- **Eigenwerte**: $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 3$, **Eigenvektoren** $\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ (pink), $\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ (blau)
- Wir betrachten die lineare Abbildung $f(\vec{x}) = A\vec{x}$



$\rightarrow$



Quelle: wikipedia.org (Autor: Lucas Vieira)

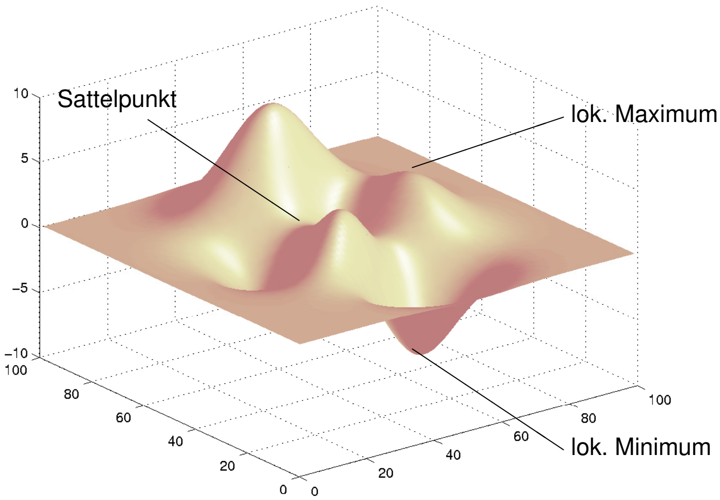
Die Eigenvektoren $\vec{x}_i$ werden um den Faktor λ_i gestreckt

Definitheit

Definition:

- Eine Matrix heißt positiv definit, wenn alle Eigenwerte $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ positiv sind
$$\lambda_i > 0, \qquad i = 1, \ldots, k.$$
- Eine Matrix heißt negativ definit, wenn alle Eigenwerte $\lambda_1, \ldots, \lambda_k$ negativ sind
$$\lambda_i < 0, \qquad i = 1, \ldots, k.$$
- Hat A positive und negative Eigenwerte, so heißt A indefinit.

Lokale Extrema im $\mathbb{R}^n$ (Mathe I)



- $\vec{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ heißt lokales Maximum (Minimum) von $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, wenn

$$f(\vec{x}_0) \geq f(\vec{x}) \quad (f(\vec{x}_0) \leq f(\vec{x}))$$

  für alle x in einer Umgebung U von $\vec{x}_0$.

- $\vec{x}_0 \in \mathbb{R}^n$ ist Sattelpunkt, wenn in einer Richtung ein lokales Minimum und in einer anderen ein lokales Maximum vorliegt.

Notwendige Bedingung 1. Ordnung

$f : D \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ zweimal stetig differenzierbar

Notwendige Bedingung 1.Ordnung

Ist $\vec{x}_0$ ein lokales Extremum, dann gilt

$$\nabla f(\vec{x}_0) = \vec{0}.$$

Wir sprechen dann von einem stationären Punkt.

Hinreichende Bedingung 2. Ordnung

Bedingungen an die Hessematrix

$$\nabla^2 f(\vec{x}_0) = \begin{pmatrix} \partial_{11} f(\vec{x}_0) & \dots & \partial_{1n} f(\vec{x}_0) \\ \vdots & & \vdots \\ \partial_{n1} f(\vec{x}_0) & \dots & \partial_{nn} f(\vec{x}_0) \end{pmatrix}$$

Sei $\vec{x}_0$ ein stationärer Punkt. Ist

- $\nabla^2 f(\vec{x}_0)$ positiv definit $\Rightarrow \vec{x}_0$ ist lokales Minimum
- $\nabla^2 f(\vec{x}_0)$ negativ definit $\Rightarrow \vec{x}_0$ ist lokales Maximum
- $\nabla^2 f(\vec{x}_0)$ indefinit und kein EW ist 0 $\Rightarrow \vec{x}_0$ ist Sattelpunkt
- Ist ein Eigenwert $\lambda = 0$, so ist keine Aussage möglich

Beispiel

Wir suchen die Extremstellen von

$$f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, \quad f(x, y, z) = x^2 + y^2 + xy + z^2$$

- **Notwendige Bedingung erster Ordnung**

  $$\vec{0} = \nabla f(x_0, y_0, z_0) = \begin{pmatrix} 2x_0 + y_0 \\ 2y_0 + x_0 \\ 2z_0 \end{pmatrix}$$

  Daraus folgt $(x_0, y_0, z_0) = \vec{0}$ als einziger stationärer Punkt

- **Hinreichende Bedingung zweiter Ordnung**: (Hesse-Matrix)

  $$\nabla^2 f(x, y, z) = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Eigenwerte der Hesse-Matrix

- Charakteristisches Polynom

$$\begin{aligned} p(\lambda) &= \det\left(\nabla^2 f(\vec{0}) - \lambda I\right) = \det\begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 2-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 2-\lambda \end{pmatrix} \\ &= (2-\lambda)\left((2-\lambda)^2 - 1\right) = (2-\lambda)\left(\lambda^2 - 4\lambda + 3\right) \\ &= -(\lambda-2)(\lambda-1)(\lambda-3) \end{aligned}$$

- Die 3 Eigenwerte $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 3$ sind positiv

  $\Rightarrow$ $\nabla^2 f(\vec{0})$ ist positiv definit

  $\Rightarrow$ f nimmt in $\vec{0}$ ein Minimum an