Contents

1 Lineare Algebra

1.1 Lineare Vektorräume

Beispiel für Vektoren mit mehr als Komponenten

Quantenmechanik:

MO-LCAO: Molecular Orbitals by Linear Combination of Atomic Orbitals

Das bindende σ-MO im H_2 ist

$$|\sigma\rangle = c_1(|1s_A + |1s_B\rangle) + c_2(|2s_A\rangle + |2s_B\rangle) + c_3(|2p_{zA}\rangle + \dots)$$

MO-Koeffizientenvektor: $(c_1, c_2, c_3, c_4, \dots)$ Def.: Eine Menge V von Vektoren $\vec{a}, \vec{b}, \dots$ heißen linearer Vektorraum, wenn gilt:

- Für alle Elemente $\vec{a}$, $\vec{b}$ Element von V gibt es genau ein Element $\vec{a} + \vec{b}$ Element von V (Die Summe zweier Elemente von V gehört wieder zu V)
- Assoziativgesetz: $\vec{a} + (\vec{b} + \vec{c}) = (\vec{a} + \vec{b}) + \vec{c}$ für $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}$ Element von V
- Kommutativgesetz: $\vec{a} + \vec{b} = \vec{b} + \vec{a}$
- Neutrales Element "Nullstelle $\vec{o}$ Element von V: $\vec{a} + \vec{o} = \vec{a}$
- Inverses Element $-\vec{a}$: $\vec{a} + (-\vec{a}) = 0$

Multiplikation mit reellen/komplexen Zahlen

- Für alle Elemente $\vec{a}$ Element V und z Element C gibt es genau ein Element $z \cdot \vec{a}$ Element V
- Assoziativgesetz
- Distributivgesetz

1.2 Dimension und Basis eines Vektorraums

Def.: Die Vektoren $\vec{a_1}, \dots, \vec{a_n}$ heißen linear unabhängig, wenn $\sum_{k=1}^{n} z_k \vec{a_k} = \vec{o}$ nur für $\vec{z_k} = 0(k = 1, \dots, \dots)$ erfüllbar ist

Ist mindestens ein $z_k \neq 0$ wählbar, so heißen die Vektoren linear abhängig, d.h. ein Vektor lässt sich als Linearkombination der anderen schreiben:

$\vec{a_k} = -\frac{1}{z_k} \sum_{l=1, l\neq k}^{n} z_l \vec{a_l} = \sum_{l=1, l\neq k}^{a} z_b \vec{a_l}$ $\qquad$ $z_b = -\frac{z_l}{z_k}$

Beispiel

$$\left[\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]$$

$$z_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + z_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + z_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \vec{o}$$

$$z_1 0 + z_2 0 + z_3 1 = 0$$

$$z_1 1 + z_2 0 + z_3 1 = 0$$

$$z_1 1 + z_2 1 + z_3 0 = 0$$

Auflösen nach z_1, z_2, z_3 durch Addition bzw. Subtraktion von Vielfachen der Zeilen (Einzelgleichungen) bis Dreiecksform erreicht wurde, anschließend z_1, z_2, z_3 durch Rück-rechnung ermitteln, dies ist der Gaußsche Algorithmus

Hierbei gibt es 4 Möglichkeiten, dies ist eine Lösung:

$$0, 0, 2|0$$

$$0, -1, 1|0$$

$$1,1,0|0$$

Durch Rückrechnung:

$$z_3 = 0, z_2 = 0, z_1 = 0$$

Die Vektoren sind linear unabhängig voneinandern d.h. (hier) sie lieben nicht in einer Ebene aber auf einer Geraden!
Das von den Vektoren aufgespannte Spat hat ein Volumen $\neq 0$, d.h. die Detrminante ist ungleich 0, hier ergibt die Determinante 2.
Das Spatprodukt geht nur mit 3 3D-Vektoren, die allgemeine Determinantenmethode geht mit n nD-Vektoren
Entstünde beim LGS eine Mullzeile, kann ein Parameter frei gewählt werden, hierbei kann man diesen z.B. durch λ ersetzen. Da i.A. $\lambda \neq 0$ gewählt werden darf, sind die Vektoren linear abhängig, d.h. die liegen in einer Ebene,
$->$ Das von den Vektoren Aufgespannte Spat hat ein Volumen $= 0$, d.h. die Determinante würde hierbei 0 ergeben.

Linear abhängig heißt, dass einige Vektoren durch andere desselben Satzes ausdrückbar sind.

$$\begin{pmatrix} 0 \\ i \\ -i \end{pmatrix} = -i \left[\begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]$$

Def.: Die Maximalzahl linearunabhängiger Vektoren in der Menge V heißt Dimension des Vektorraums.

Beispiel:

Vorstellung	Dimension
Punkt	0
Gerade	1
Ebene	2
Raum	3

$->$ Die Vektoren $\vec{o}, \vec{a}$ sind immer linear abhängig.
$->$ m $>$ n n-dimensionale Vektore sind immer linear abhängig.
Def.: Eine Menge B, die die Maximalzahl lineat unabhängiger Vektoren in der Menge V enthält, heißt Basis des Vekotrraumes V. Jeder Vektor $\vec{a_i}$ Element in V lässt sich als Linearkombination der Basisvektoren $\vec{b_j}$ Element in B c V. darstellen:

$$\vec{a_i} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ki} \vec{b_k} = (\alpha_{1i}, \alpha_{2i}, \alpha_{3i}, \ldots, \alpha_{ni})$$

Dies ist die Komponentendarstellung

Anmerkung: Im allgemeinen gibt es mehr als nur eine mögliche Basis.
Aber: Die Anzahl der linear unabhängigen Basisvektoren ist immer gleich der Dimensionalität.

Beispiel: 3D-Raum
Basis:

$$i = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, k = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Beliebiger Vektor darstellbar durch

$$\vec{a_i} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ki} \vec{b_k}$$

Zum Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = 3i + j - k$$

Diese abkürzende Schreibweise gibt nur die Koeffizienten α_{ki} an, nicht die Basisvektoren. Sie macht aber ohne Festlegung der Basisvektoren keinen Sinn, denn in anderer Basis sind die Koeffizienten im Allgemeinen anders.

Neue Basis (ausgedrückt in alter Basis i, j, k)

$$\vec{l} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} = i + j$$

$$\vec{m} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} = i - j$$

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = -k$$

Selber Vektor von oben in neuer Basis:

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} + \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}_{ijk} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk}$$

$$\begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}_{ijk} = 2\vec{l} + \vec{m} + \vec{n} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}_{lmn}$$

Beispiel: $\left\{1, x, x^2, \ldots\right\}$ bilden die Basis der unendlich dimensionalen Vektorraums der Polynome.

$$P_5\left(x\right) = 7 + 3x^2 + 4x^3 - x^5$$

ist darstellbar als

$$(7, 0, 3, 4, 0, -1)$$

Dies sind die jeweiligen Koeffizienten.
Def.: Eine Teilmenge von Vektoren eines Vektorraums $\mathbb{V}$ bildet einen Untervektorraum $\mathbb{U}$, wenn alle Kriterien einer Vektorraumes erfüllt werden.
Trivial: $\{\vec{o}\}$ sowie $\mathbb{V}$ sind Untervektorräume von $\mathbb{V}$.
Beispiel:
Gerade ist eindimensionaler Unterraum einer Ebene. Ebene ist zweidimensionaler Unterraum des 3D-Raums.

1.3 Spezielle lineare Vektorräume

1.3.1 Euklidische Vektorräume

a) Def.: Eine mathematische Operation φ, die zwei Vektoren eines Vektorraums $\mathbb{V}$ eine reelle Zahl zuordnet, heißt Skalarprodukt, wenn gilt:
für $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c} \in \mathbb{V}$

1) Distributivgesetz
2) Kommutativgesetz
3) Homogenität $x \in \mathbb{R}$

   $\varphi\left(x\vec{a}, \vec{b}\right) = \varphi\left(\vec{a}, x\vec{b}\right) = x\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right)$

- positive Definitheit

  $\varphi\left(\vec{a}, \vec{a}\right) > 0$ für $\vec{a} \neq \vec{0}$

Beispiel: Skalarprodukt zwischen

$$\vec{a} = (x_a, y_a), \vec{b} = (x_b, y_b)$$

$$=> \vec{a}\vec{b} = x_a x_b + y_a y_b$$

Beispiel Skalarprodukt zwischen $|a\rangle = a(x), |b\rangle = b(x)$

$$=> \varphi(a, b) =< a|b\rangle = \int a(x)b(x)dx$$

b) Def.: Die Norm (Länge) eines Vektors $\vec{a} \in \mathbb{V}$ ist von der Definition her:

$$||\vec{a}|| = \sqrt{\varphi(\vec{a}, \vec{a})} = \sqrt{\vec{a} \cdot \vec{a}}$$

Anmerkung: Das ist eine von unendlich vielen möglichen Norm-Definitionen
Einheitsvektor, normierter Vektor $\hat{a} : ||\hat{a}|| = 1$

$$\hat{a} = \frac{\vec{a}}{||\vec{a}||}$$

für $\vec{a} \neq \vec{o}$
Winkel zwischen zwei Vektoren

$$\cos\gamma = \frac{\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right)}{||\vec{a}|| \cdot ||\vec{b}||} = \frac{\vec{a}\vec{b}}{||\vec{a}|| \cdot ||\vec{b}||}$$

Zwei Vektoren sind orthogonal, wenn $\varphi\left(\vec{a}, \vec{b}\right) = \vec{a}\vec{b} = 0$ gilt:
Spezialfall $\vec{o}\vec{a} = 0$ für alle $\vec{a}$
Anmerkung: Bisher war der Betrag des Vektors $\vec{a}\,(x_a, y_a)$ gegeben als:

$|\vec{a}| = \sqrt{x_a^2 + y_a^2 + z_a^2}$

Warum als $||\vec{a}||$?

Verallgemeinerung auf Funktionen erfordert eine Unterscheidung.
Betragsbildung:

$$f(x) = -x^2, |f| = |-x^2| = x^2; x \in \mathbb{R}$$

Normbildung:

$$f(x) = -x^2, ||f|| = \left[\int_{x_1}^{x_2} \left(-x^2\right)^2 \, dx\right]^{\frac{1}{2}}$$

$$= \left[\int_{x_1}^{x_2} x^4 \, dx\right]^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{x^5}{5}|_{x_1}^{x_2}\right]^{\frac{1}{2}} = \text{Zahl}$$

c) Def.: Ein Satz von Basisvektoren $\{\vec{e_i}\}$ heißt Orthonormalsystem (orthonomiert), wenn gilt:

$$\varphi(\hat{e_i}, \hat{e_j}) = \hat{e_i}\hat{e_j} = \delta_{ij} = 1\,(i = j)\,\text{bzw.}0\,(i \neq j)$$

Ist die Anzahl der Basisvektoren gleich der DImension des Vektorraums, so geiüt die Basis vollständig. (<u>V</u>ollständig <u>O</u>rtho<u>N</u>ormal<u>S</u>ystem, VONS)
Satz: Sind die $m \leq n$ Vektoren $\vec{e_1}, \vec{e_2}, \vec{e_3}, \ldots, \vec{e_m}$ in $\mathbb{V}^n$ paarweise zueinander orthogonal, so sind sie auch linear unabhängig. (Die Untersuchung des Satzes gilt nicht!)
Beispiel: Basisvektoren $\left\{\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}\right\}$ des dreidimensionalen Raums: karthesisches Koordinatensystems
Jeder Vektor $\vec{a} \in \mathbb{V}$ lässt sich nach einem VONS entwickeln.

$$\vec{a} = \sum_{i=1}^{n} a_i \hat{e_i} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$$

$\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ nach $\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$ entwickeln: $\vec{a} = 3\hat{i} + 2\hat{j} + \hat{k}$ Komponentendarstellung des Skalarprodukts (in einem Orthonormalsystem)

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \left(\sum_{i=1}^{n} a_i \hat{e_i} \right) \left(\sum_{j=1}^{n} b_j \hat{e_j} \right) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i b_j (\hat{e_i} \hat{e_j}) = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i$$

Wobei $\hat{e_i}\hat{e_j} = \delta_{ij}$ c) Konsturktion eines ONS aus linear unabhängigen Vektoren
Das Gramschmidsche Orthogonalitätsverfahren.

gegeben: linear unabhängiger, jedoch nicht notwendigerweise normierter und nicht notwendigerweise orthogonale Vektoren $\{\vec{a_i}\}$.

gesucht:ONS im von $\{\vec{a_i}\}$ aufgespannten Vektorraum.

Vorgehen:

1) Normierung von $\vec{a_1} : \hat{a}_1 = \frac{\vec{a_1}}{||\vec{a_1}||}$
2) Setze $i = 2$
3) Orthogonalisierung von $\vec{a_i}$ auf alle $\vec{a_j}$ mit $j < i$

   $\vec{a_1}' = \vec{a_i} - \sum_{j=1}^{i-1} (\hat{a}_j \vec{a_i})\, \hat{a}_j$

   wobei $\hat{a}_j \vec{a_i}$ die Komponente von $\vec{a_i}$ in Richtung von $\hat{a}_j$ ist

   Notiz: **Das Skalarprodukt eines Vektors $\vec{r}$ mit einem Einheitsvektor $\hat{e}$ ergibt die Projektion von $\vec{r}$ auf die Richtung von $\hat{e}$**

4) Normierung von $\vec{a_i}' : \hat{a}_i = \frac{\vec{a_i}'}{||\vec{a_i}||}$
5) Erhöhe i um 1 für $i < n$ und gehe zurück zu 3), ansonsten fertig, wenn $i = n$

Beispiel:
VONS aus

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\} = \{\vec{a_1}, \vec{a_2}, \vec{a_3}\}$$

Lineare Unabhängigkeit, da das Bilden der Determinanten $\neq 0$ als Ergebnis liefert.

1) Normierung von $\vec{a_1} : \hat{a}_1 = \frac{\vec{a_1}}{||\vec{a_1}||} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$
2) Orthogonalisierung von $\vec{a_2}$ auf $\hat{a}_1$:

$$(\vec{a_2} \cdot \hat{a}_1) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{-}\sqrt{2}$$

$$(\vec{a_2} \cdot \hat{a}_1)\, \hat{a}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a_2}' = \vec{a_2} - (\vec{a_2}\hat{a}_1)\, \hat{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

3) Normierung von $\vec{a_2}'$

$\hat{a_2} = \frac{\vec{a_2}'}{||\vec{a_2}'||} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$

4) Orthogonalisierung von $\vec{a_3}$ auf $\hat{a_1}$ und $\vec{a_2}$

$$\vec{a_3}' = \vec{a_3} - (\vec{a_3}\hat{a_1})\,\hat{a_1} - (\vec{a_3}\hat{a_2})\,\hat{a_2}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_1})\,\hat{a_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_2}) = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}}(-1+2) = \frac{1}{\sqrt{6}}$$

$$(\vec{a_3}\hat{a_2})\,\hat{a_2} = \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\vec{a_3}' = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{6} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{4}{6} \\ \frac{4}{6} \\ \frac{4}{6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

5) Normierung von $\vec{a_3}'$: $\hat{a_3} = \frac{\vec{a_3}'}{||\vec{a_3}'||} = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Test:

$$\det(\hat{a_1}, \hat{a_2}, \hat{a_3}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{vmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 \\ 0 & 2 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{6}(1+2+2+1) = 1$$

Das Ergebnis eines VONS-Rechtssystemes ist **IMMER** 1!

1.4 Lineare Operatoren

1.4.1 Grundlagen

Def.: Ein Operator A ist eine (Rechen-) Vorschrif, durch welche einem Vektor $|a\rangle$ (einer Funktion a) ein Vektor $|b\rangle$ (eine Funktion b) zugeorddnet werden kann.

$$A|a\rangle = |b\rangle$$

Für einen linearen Operator gilt:

$$A(|a\rangle + |b\rangle) = A|a\rangle + A|b\rangle$$

$$A(\alpha|a\rangle) = \alpha(A|a\rangle)$$

Dies gilt für alle $|a\rangle, |b\rangle \in \mathbb{V}$ und $\alpha \in \mathbb{R}$
Satz: Ist A, B linear, so ist auch $(A+B), (A \cdot B)$ linear
Beispiele: Translation, Rotation, Inversion, ...

1.4.2 Verknüpfung von Operatoren

a) Summe: $(A+B)|a\rangle = A|a\rangle + B|b\rangle$

b) Produkt: $(A \cdot B)|a\rangle = A(B|a\rangle) \neq B(A|a\rangle)$
Im Allgemeinen Nichtvertauschbarkeit von A und B

Beispiel:

A: "Quadrieren", Skalarproduktbildung mit sich selbst.

B: Multiplizieren mit $\alpha \in \mathbb{R}$

$$AB|a\rangle = A|\alpha a\rangle = \langle a\alpha|\alpha a\rangle = \alpha^2\langle a|a\rangle$$
$$BA|a\rangle = B\langle a|a\rangle = \alpha\langle a|a\rangle$$

Das heißt: $(AB - BA)|a\rangle \neq 0$
Definition $[A,B] = [A,B]_- = AB - BA$ Kommutator
$[a,B]_+ = AB + BA$ Antikommutator

Zwei Operatoren heißen vertauschbar (kommutieren), wenn gilt: $[A,B] = 0$

Beispiel:

A: Drehung um $\frac{\pi}{2}$ (gegen den Uhrzeigersinn)

B: Spiegelung an $y = 0$ (x-Achse)

1.5 Matrizen

1.5.1 Matrixdarstellung von Operatoren

Gegeben: VONS $\{|\hat{e}_i\rangle\}$, linearer Operator A

Alle Informationen über die Wirkungsweise von A steckt in den den Bildvektoren $\{|A\hat{e}_i\rangle\}$!

$$A|a\rangle = A\sum_{i=1}^{n} a_i|\hat{e}_i\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i(A|\hat{e}_i\rangle) = |b\rangle$$

quadratisches Zahlenschema mit $A|\hat{e}_i\rangle$ als i-te Spalte
Matrixdarstellung von A in der Basis $\{|\hat{e}_i\rangle\}$ (Basisabhängig)

Es gilt:

$$|b\rangle = \sum_k b_k\vec{e}_k = A\sum_l a_l\vec{e}_l = \sum_l a_l A\vec{e}_l$$

Multipliziere mit $\vec{e}_j$ ergibt

$$\sum_k b_k\vec{e}_j\vec{e}_k = \sum_l a_l\vec{e}_j A\vec{e}_l = b_j = \sum_l A_{jl}a_l$$

$\vec{e}_j\vec{e}_k = \delta_{jk}$ und $\vec{e}_j A\vec{e}_l = A_{jl}$

Beispiel: Spiegelung an der xz-Ebene und die Streckung um den Faktor 2
VONS $\left\{\hat{\imath}, \hat{\jmath}, \hat{k}\right\}$

$$A\hat{\imath} = 2\hat{\imath}$$

$$A\hat{\jmath} = -2\hat{\jmath}$$

$$A\hat{k} = 2\hat{k}$$

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

Spiegelung des Vektors $\vec{a} = (1,2,3)$ an der xz-Ebene und Streckung um den Faktor 2.

$$A|a\rangle = \sum_i a_i \left(A|\hat{e}_i\rangle\right) \Rightarrow \left(A|a\rangle\right)_j = \sum_i a_i A_{ji}$$

Merkschema: Matrix A mal Vektor a

$$A\vec{a} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\cdot 1 & 0\cdot 2 & 0\cdot 3 \\ 0\cdot 1 & -2\cdot 2 & 0\cdot 3 \\ 0\cdot 1 & 0\cdot 2 & 2\cdot 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ -4 \\ 6 \end{pmatrix}$$

1.5.2 Addition und Multiplikation von Matrizen

(A,B sind Matrixdarstellungen linearer Operatoren)

Addition:

$$(A+B)|a\rangle = A|a\rangle + B|a\rangle$$

i-te Komponente:
Linke Seite:

$$\left[(A+B)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} (A+B)_{ij}\, a_j$$

Rechte Seite:

$$= \left[A|a\rangle\right]_i + \left[B|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} A_{ij} a_j + \sum_{j=1}^{n} B_{ij} a_j$$

Somit:

$$= \left(A_{ij} + B_{ij}\right) a_j$$

$\rightarrow$ Matrizen werden addiert (subtrahiert), indem man ihre Elemente addiert (subtrahiert):

$$(A \pm B)_{ij} = A_{ij} \pm B_{ij}$$

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 5 & 8 \end{pmatrix}$$

Multiplikation:

$$(AB)|a\rangle = A(B|a\rangle)$$

i-te Komponente: linke Seite:

$$\left[(AB)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{j=1}^{n} (AB)_{ij}\, a_j =$$

rechte Seite:

$$\left[A\,(B)\,|a\rangle\right]_i = \sum_{l=1}^{n} A_{il}\left[B|a\rangle\right]_l = \sum_{l=1}^{n} A_{il} \sum_{j=1}^{n} B_{lj} a_j$$

$$= \sum_{j=1}^{n} \sum_{l}^{n} A_{il} B_{lj} a_j$$

Das ij-te Element der Produktmatrix (AB) ist das Skalarprodukt der i-ten Teile von A und der j-ten Spalte von B.

$$(AB)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} A_{il} B_{li}$$

Es ist keine Matrixdivision definiert - wohl aber eine Inversion A^{-1}
Beispiele: Pauli-Spinmatrizen

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_x \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$$

Beispiel: Aus A^2 folgt nicht $A = 0$!

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

1.6 Matrizen mit speziellen Eigenschaften

1.6.1 Die Einheitsmatrix E (auch $I, 1$)

$$E_{ij} = \delta_{ij} = \begin{matrix} 0 \text{ für } i \neq j \\ 1 \text{ für } i = j \end{matrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Es gilt: $AE = EA = A$ mit $E|a\rangle = |a\rangle$
ij-tes Element

$$(AE)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} A_{il} \delta_{lj} = A_{ij}$$

$$(EA)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} \delta_{il} A_{lj} = A_{ij}$$

i-te Komponente

$$(E|a\rangle)_i = \sum_{j=1}^{n} E_{lj} a_j = \sum_{j=1}^{n} \delta_{ij} a_j = a_i$$

1.6.2 Digitalmatrix D

Besonderheit: $AB = BA$, wenn A und B beide diagonal sind.
Die Spur einer Matrix ist die Summe ihrer Diagonalelemente.

$$Sp(D) = \sum_i d_i, Sp(E) = n$$

allgemein:

$$Sp(A) = \sum_i A_{ii}$$

$$Sp(AB) = Sp(BA)$$

Es gilt: D^m ist die Matrx im $(D^m)_{ij} = d_i^m \delta_{ij}$ für $, \in \mathbb{R}$
Beispiel:

$$(D^2)_{ij} = \sum_{l=1}^{n} D_{il} D_{lj} = \sum_{l=1}^{n} d_i d_j \delta_{il} \delta_{lj} = d_i^2 \delta_{ij}$$

1.6.3 Die inverse Matrix

Definition:

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

A^{-1} repräsentiert diejenige Operation, die die durch A repräsentierte Operation rückgängig macht
A^{-1} existiert, falls $\det(A) \neq 0$ gilt: A heißt dann reguläre Matrix und ist invertierbar (sonst ist A singulär)
Beispiel: Inverse Matrix von $A = \begin{matrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{matrix}$
$\det(A) = 1$, d.h. A ist regulär, A^{-1} existiert.

$$AA^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E$$

1)

$$a = 1, -a + c = 0 \rightarrow c = 1$$

2)

$$b = 0, -b + d = 1 \rightarrow d = 1$$

somit:

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

1.6.4 Die transponierte Matrix $\tilde{A}, A^T, A^+$

Def.:

$$(\tilde{A})_{ij} = A_{ji}$$

$\tilde{A}$ entsteht aus A durch Vertauschen von Zeilen und Spalten bzw. durch Spiegelung der Matrix an der Hauptdiagonalen
Def.: Symmetrische Matrix: $\tilde{A} = A$ Beispiel:

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

Def.: Orthogonale Matrix $\tilde{A} = A^{-1}$
Beispiel:

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

Eigenschaften orthogonaler Matrizen:
1.

$$AA^{-1} = E = A\tilde{A}$$

Wobei $A\tilde{A}$ das Skalarprodukt der i-ten und j-ten Teilen von A ergibt δ_{ij}, das heißt Zeilenvektoren sind othonormiert.
2.

$$1 = \det(E) = \det(AA^{-1}) =^{*} \det(A)\det(A^{-1}) = \det(A)\det(\tilde{A}) = [\det(A)]^2$$

* - Eigenschaften von Determinanten det:

- $\det(A) = \det(\tilde{A})$
- $\det(AB) = \det(A) \cdot \det(B)$

Es muss gelten:

$$\det(A) = \pm 1, \text{ falls} A \text{ eine orthogonale Matrix ist}$$

Ganz allgemein:

$$(AB)^T = B^T A^T$$

1.6.5 Die adjungierte Matrix A^+

Erweiterung der Transporniertenbildung auf komplexe Matrizen
Def.:

$$A^+ = (\tilde{A})^*$$

Def.: selbstadjungierte Matrix (hermitische Matrix)

$$A^+ = A$$

(entspircht symmetrischen Matrizen im Komplexen)
Beispiel: alle quantenmechanische Operatoren sind hermitische

$$s_y = \frac{1}{2}\sigma_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$s_y^+ = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^* = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = s_y$$

Def.: Unitäre Matrizen $A^+ = A^-1$ entsprechen orthogonalen Matrizen im komplexen Zahlenraum

1.7 Determinanten

1.7.1 Definition

Die Determinante einer quadratischen Matrix A der Dimension n ist eine Zahl, welche durch Anwendung der folgenden Rechenvorschrift bestimmt wird.

$$\det(A) = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} =^{Def} \sum_p (-1)^{j(p)} \cdot A_{1i_1} \cdot A_{2i_2} \cdot A_{3i_3} \cdot \dots \cdot A_{ni_n}$$

$\sum_p$ gibt somit die Summer über alle möglichen Permutationen der Zahlen $1, 2, \dots, n$ an.
$j(p)$ ist die Anzahl der INversionen der Permutationen $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ i_1 & i_2 & \dots & i_n \end{pmatrix}$.
Beispiel:

$$\begin{vmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 0 & 4 & -1 \\ 2 & 1 & 7 \end{vmatrix} = \begin{array}{ccccccc} A_{1i_1}\cdot & A_{2i_2}\cdot & A_{3i_3} & i_1 & i_2 & i_3 & j \\ (+)3\cdot & 4\cdot & 7 & (1 & 2 & 3) & 0 \\ -3\cdot & (-1)\cdot & 1 & (1 & 3 & 2) & 1 \\ -1\cdot & 0\cdot & 7 & (2 & 1 & 3) & 1 \\ (+)1\cdot & (-1)\cdot & 2 & (2 & 3 & 1) & 2 \\ (+)2\cdot & 0\cdot & 1 & (3 & 1 & 2) & 2 \\ -2\cdot & 4\cdot & 2 & (3 & 2 & 1) & 1 \end{array}$$

$$84 + 2 - 0 - 2 + 0 - 16 = 69$$

Bemerkungen:
- Determinanten stellen eine Kerngröße für eine Matrix dar. **1.** Laplace'scher Entwicklungssatz:

- Entwischlung nach der i-ten Zeile

$$\det(A) = \sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik}$$

Wobei D_{ik} eine Unterdeterminante ist das heißt, Determinante der $(n-1) \times (n-1)$ Matrix, die entsteht, wenn von A die i-te Zeile und k-te Spalte gestrichen wird.
2. Entwicklung nach der Spalte

$$det(A) = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik}$$

Wiederholte Anwendung des Entwicklungssatzes: Zurückführen auf Unterdeterminanten 3.Ordnung und 2. Ordnung

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a\begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b\begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} - c\begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix} = aei + bfg + cdh - ceg - bdi - afh$$

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

Beispiel:

$$\begin{vmatrix} (+)2 & 7 & 1 & 4 \\ (-)5 & (+)0 & (-)0 & (+)3 \\ -1 & 2 & 1 & 0 \\ 4 & 5 & -1 & 1 \end{vmatrix} = -5 \begin{vmatrix} 7 & 1 & 4 \\ 2 & 1 & 0 \\ 5 & -1 & 1 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 2 & 7 & 1 \\ -1 & 2 & 1 \\ 4 & 5 & -1 \end{vmatrix}$$

Hier wurde nach der 2. Zeile entwickelt, da nur 2 Unterdeterminanten notwendig sind.

$$-5(7 - 8 - 20 - 2) + 3(-4 + 28 - 5 - 8 - 10 - 7) = 97$$

Spezialfall: Determinante einer Dreiecksmatrix ist das Produkt der Diagonalelemente

$$\begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 0 \\ 7 & -1 & 3 & 0 \\ 5 & 0 & 6 & 4 \end{vmatrix} = 4 \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \\ 7 & -1 & 3 \end{vmatrix} = 4 \cdot 3 \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 2 \end{vmatrix} = 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1 = 24$$

Hier wurde jeweils nach der letzten Spalte entwickelt.

1.7.2 Eigenschaften von Determinanten

a) Eine Determinante verschwindet (hat den Wert 0), wenn Zeilen (doer Spalten) linear abhängig (oder identisch) sind.

Beweis: Laplace-Entwicklung bis zur Unterdeterminante 2.Ordnung

$$\begin{vmatrix} \lambda a & \lambda b \\ a & b \end{vmatrix} = \lambda ab - \lambda ab = 0$$

$$\begin{vmatrix} \lambda a & a \\ \lambda b & b \end{vmatrix} = \lambda ab - \lambda ab = 0$$

b) Die Bildung der transponierten Matrix ändert nicht den Wert der Determinante.

Beweis: zeilen bzw. Spalten spielen bei der Definition der Determinante bzw. im Laplace-Entwicklungssatz dieselbe Rolle.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc, \begin{vmatrix} a & c \\ b & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

c) Ein gemeinsamer Faktor in <u>einer</u> Zeile (Spalte) kann vor die Determinante gezogen werden.

Beweis: Entwicklung nach der Zeile (Spalte), aus der λ herausgezogen werden soll:

$$\sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} (\lambda A_{ik}) D_{ik} = \lambda \sum_{k=1}^{n} (-1)^{i+k} A_{ik} D_{ik} \text{ für } i\text{-te Zeile}$$

d) Die Vertauschung zweier Zeilen bzw. Spalten ändert das Vorzeichen der Determinanten

Beweis: Rückführung auf Unterdeterminante 2.Ordnung mit dem Laplace-Entwicklungssatz, wobei diese die Elemente der zu vertauschenden Zeilen (Spalten) enthalten.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - cb = -(bc - ad) - \begin{vmatrix} c & b \\ a & b \end{vmatrix} = - \begin{vmatrix} b & a \\ d & c \end{vmatrix}$$

e) Zeilen bzw. Spalten in Determinanten können beliebig linearkombiniert werden, ohne dass sich der Wert der Determinanten ändert.

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c + \lambda a & d + \lambda b \end{vmatrix} = ad + \lambda ab - bc - \lambda ab = ad - bc$$

f) Multiplikationssatz für Determinanten: $\det(AB) = \det(A) \det(B)$

$$\det(A)\det(B) = \begin{pmatrix} ae+bg & af+bh \\ ce+dg & cd+dh \end{pmatrix} = AB$$

$$\det(AB) = (ae+bg)(cf+dh)-(ce+dg)(af+bh) = acef+adeh+befg+bdgh-acef-bceh-adfg-bdgh$$
$$= (ad-cb)(eh-fg) = \det(A)\det(B)$$

Warnung: Es gilt <u>nicht</u>: $\det(A+B) = \det(A)+\det(B)$

$$\det(A+A) = \det(2A) = 2^n \det(A)$$

Wobei n die Dimension der Matrix ist, der Faktor 2 kann aus jeder Zeile/Spalte herausgezogen werden.

$$\det(A^2) = \det(A\cdot A) = \det(A)\det(A) = [\det(A)]^2$$

Anwendung:

$$1 = \det(E) = \det(AA^{-1}) = \det(A)\det(A^{-1})$$
$$\Rightarrow \det(A^{-1})\frac{1}{\det(1)}$$

Das heißt: $\det(A) \neq 0$ muss gelten, damit $\det(A^{-1})$ existiert.

1.8 Lineare Gleichungssysteme

1.8.1 Gaußsche Algorithmen

Lineares GLeichungssystem (n-Gleichungen für n Unbekannte x_i)

$$\begin{aligned} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n &= b_1 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \cdots + A_{2n}x_n &= b_2 \\ A_{31}x_1 + A_{32}x_2 + \cdots + A_{3n}x_n &= b_3 \\ &\vdots \\ A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \cdots + A_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

Sas System heißt linear, weil alle x_i nur in 0-ter Ordnung oder 1-ter Potenz vorkommen.
Alle A_{ij} und b_i sind bekannt.
In Matrixschreibweise:

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

Homogenes Gleichungssystem: $\vec{b} = \vec{o}$
Inhomogenes Gleichungssystem: $\vec{b} \neq \vec{o}$

Achtung: Ein lineares Gleichungssystem ist nicht zwangsläufig lösbar!

a) Lösung mit der inversen Koeffizientenmatrix

$$A^{-1} \,|\, A\vec{x} = \vec{b} \to \vec{x} = A^{-1}\vec{b}$$

Die Methode versagt, wenn A^{-1} nicht existiert, es muss gelten: $\det(A) \neq 0$, A muss eine reguläre Matrix sein.

b) Cramersche Regel

$$x_k = \frac{\det(A_k)}{\det(A)}$$

A_k: Matrix A, in der die k-te Spalte durch $\vec{b}$ ersetzt wurde.
Die Methode versagt, wenn $\det(A) = 0$.

c) Gaußscher Algorithmus (Methode der Wahl)
Erweitertes Koeffizientenschema

$$\begin{aligned} A_{11}A_{12}\ldots A_{1n}&|b_1\\ A_{21}A_{22}\ldots A_{2n}&|b_2\\ &\vdots\\ A_{n1}A_{n2}\ldots A_{nn}&|b_n \end{aligned}$$

Es sollte wieder ein 0-Dreieck geschaffen werden, um eine Rückrechnung zu ermöglichen.

α) Vertauschen von Zeilen (einzelner Gleichungen)

β) Bilden von Linearkombinationen von Zeilen.

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \vec{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Koeffizientenschema:

$$\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{array}$$

(2) - (3)

$$\begin{array}{ccc|c} 1 & -1 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{array}$$

Mit Vertauschen:

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{array}$$

Hier wurde die Dreiecksform, bzw. das Nullerdreieck geschaffen.
Lösung des <u>homogenen</u> Gleichungssystemes: Anzahl der Nullzeilen $d = 0$

$$\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \end{array}$$

$\Rightarrow \vec{x_{hom}} = \vec{o}$
Allgemein gilt:

- Wenn das Koeffizientenschema in Dreiecksform keine Nullzeiele hat, dann ist $\vec{x_{hom}} = \vec{o}$ die einzige Lösung

Lösung des <u>inhomogenen</u> Gleichungssystems: Anzahl Nullzeilen $d' = 0$, $d' = d$

$$\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 3 \end{array}$$

Für $d = d'$ hat das inhomogene Gleichungssystem nur eine eindeutige Lösung.

Beispiel 2:

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

Koeffizientenschema:

$$\begin{array}{rrrl} 2 & -2 & 0 & |\,2 \\ 2 & 1 & 1 & |\,2 \\ -1 & 1 & 0 & |\,1 \end{array}$$

$$\begin{array}{rrrl} 0 & 0 & 0 & |\,0 \\ -1 & 1 & 0 & |-1 \\ 2 & 1 & 1 & |\,2 \end{array}$$

Lösung des homogenen Gleichungssystems: Anzahl der Nullzeilen $d = 1$

$$\begin{array}{rrrl} 0 & 0 & 0 & |\,0 \\ -1 & 1 & 0 & |\,0 \\ 2 & 1 & 1 & |\,0 \end{array}$$

eine Nullzeile: Wahl des Parameters $x_1 = \lambda$, dadurch: $x_2 = \lambda$, dadurch: $x_3 = -3\lambda$

$$\vec{x_{hom}} = \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Allgemein gilt: treten im Koeffizientenschema in Dreiecksform $d \neq 0$ Nullzeilen auf, so sind d Unbekannte frei wählbar $\rightarrow$ d-parametrige Lösungsschar

Lösung des inhomogenen Gleichungssystem: Anzahl der Nullzeilen $d' = 1$

$$\begin{array}{rrrl} 0 & 0 & 0 & |\,0 \\ -1 & 1 & 0 & |-1 \\ 2 & 1 & 1 & |\,2 \end{array}$$

eine Nullzeile: Wahl des Parameters: $x_1 = \lambda$

$$\begin{aligned} -\lambda + x_2 = -1 \Rightarrow x_2 &= \lambda - 1 \\ \Rightarrow x_3 &= 3 - 3\lambda \end{aligned}$$

$$\vec{x_{ih}} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -3 \end{pmatrix} = \vec{x_p} + \vec{x_{hom}}$$

Allgemein gilt:

Treten im erweiterten Koeffizientenschema $d' \neq 0$ Nullzeilen auf, so ist die allgemeine Lösung eine d-parametrige Schar.

Satz:

Die allgemeine Lösung $\vec{x_{ih}}$ eines inhomogenen linearen Gleichungssystems lässt sich als Summe aus der allgemeinen Lösung des homogenen Systems $\vec{x_{hom}}$ und einer partikulären Lösung (speziellen Lösung) des Systems schreiben.

Beweis:

$$\begin{aligned} A\vec{x_{ih}} &= \vec{b} \\ A(\vec{x_{hom}} + \vec{x_p}) = A\vec{x_{hom}} + A\vec{x_p} &= \vec{O} + \vec{b} \end{aligned}$$

Beispiel 3:

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

Koeffizientenschema:

$$\begin{array}{rrrl} 2 & -2 & 0 & |\,1 \\ 2 & 1 & 1 & |\,2 \\ -1 & 1 & 0 & |-1 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 \end{array}$$

Lösen des homogenen Gleichungssystems bleibt gleich wie bei Beispiel 2.

Lösen des inhomogenen Gleichungssystems:

$$\begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & -1 \\ 2 & 1 & 1 & 2 \end{array}$$

Da $0 \neq -1$ ist dies ein Widerspruch und somit nicht lösbar!

Allgemein glit:

> Stimmen die Anzahlen der Nullzeilen im Koeffizientenschema (d) und im erweiterten Koeffizientenschme (d') nicht überein ($d \neq d'$), so ist das Gleichungssystem nicht lösbar.

Rechenregeln für:

a) Matritzen

b) Determinanten

c) Koeffizientenschemata

1) Gemeinsame Faktoren
   a) Kann vorgezogen werden, wenn er in <u>allen</u> Elementen der Matrix enthalten ist.
   b) Kann vorgezogen werden, wenn er in <u>einer</u> Zeile oder Spalte enthalten ist.
   c) Kann gekürtzt werden, wenn er in <u>allen</u> Elementen <u>einer</u> Zeile oder Spalte enthalten ist.

2) Vertauschen von Zeilen bzw. Spalten
   a) Nicht erlaubt
   b) Die Vertauschung von Zeilen bzw. Spalten verändert das Vorzeichen
   c) Vertauschung von Zeilen ist erlaubt

3) Linearkombinationen von Zeilen bzw. Spalten
   a) nicht erlaubt
   b) erlaubt für Zeilen bzw. Spalten
   c) ist erlaubt für Zeilen

1.9 Basistransformation

Gegeben: linearer Vektorraum $\mathbb{V}$, Dimension n
Basissysteme: $\{\vec{e_i}\}$ "alte Basis"
$\{\vec{e_i'}\}$ "neue Basis"

Gesucht: Umrechnungsbeziehung zwischen dern Basissystemen sowie für die Matrix- und Komponentendarstellung von Operatoren bzw. Vektoren in den Basissystemen.

1.9.1 Transformationsmatrix

Komponentendarstellung der $\{\vec{e_i'}\}$ in $\{\vec{e_i}\}$

$$\vec{e_i} = \sum_{j=1}^{n} C_{ji}\vec{e_j} = \begin{pmatrix} C_{1i} \\ C_{2i} \\ \vdots \\ C_{ni} \end{pmatrix}$$

Zusammenfassung der C_{ji} als Matrix:

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \dots & C_{1n} \\ C_{21} & C_{22} & \dots & C_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{n1} & C_{n2} & \dots & C_{nn} \end{pmatrix}$$

Transformationsmatrix:
Spaltvektoren sind die neuen Basisvektoren ausgedrückt in der alten Basis:
$\{\vec{e_1'}\}$, $\{\vec{e_2'}\}$, $\{\vec{e_3'}\}$ in $\{\vec{e_i}\}$

1.9.2 Transformation von Vektoren in Komponentendarstellung

Vektor $\vec{a}$ in alter Basis $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, \dots)$, in neuer Basis $\vec{a'} = (a_1', a_2', a_3', \dots)$
' bezeichnet keinen anderen Vektor, sonder symbolisiert nur di eDasrtellung einer anderen Basis.

Es muss gelten:

$$\vec{a} = \vec{a'}$$

Gilt für die Vektoren an sich und bedeutet <u>nicht</u> Gleichheit der Komponenten

$$\underbrace{\sum_{j=1}^{n} a_j\vec{e_j} = \sum_{i=1}^{n} a_i'\vec{e_i'} = \sum_{i=1}^{n} a_i' \left(\sum_{j=1}^{n} c_{ji}\vec{e_j}\right) = \sum_{j=1}^{n} \left(\sum_{i=1}^{n} a_i' c_{ji}\right) \vec{e_j}}$$

Koeffizientenvergleich:

$$a_j = \textstyle\sum_{i=1}^{n} a_i' c_{ji} \qquad \begin{aligned} \vec{a} &= C\vec{a'} \\ C^{-1}\vec{a} &= \vec{a'} \end{aligned}$$

1.9.3 Transformation der Matrixdarstellung von Operatoren

Operator A in alter Basis A, in neuer Basis A'
Abbildung eines Vektors $\vec{a}$ durch A auf einen Vektor $\vec{b}$ alte Basis: $\vec{b} = A\vec{a}$

Basistransformation von $\vec{a}$ und $\vec{b}$ (siehe 1.9.2)

$$C\vec{b'} = A(C\vec{a'})$$
$$\vec{b'} = C^{-1}AC\vec{a'}$$

n neue Basis: $\vec{b'} = A'\vec{a'}$
Koeffizientenvergleich:

$$A' = C^{-1}AC$$

A' ist der Operator in neuer Basis und A in alter Basis.
Beispiel: alte Basis $\vec{e_1} = (1,1)\vec{e_2} = (1,-1s)$
neue Basis: $\vec{e_1'} = (1,0)\vec{e_2'} = (0,1)$

Aufstellen der Transformationsmatrix
1.Spalte:

$$\vec{e'}: \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = C_{11} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{12} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

2.Spalte

$$\vec{e'_2}: \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = C_{21} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + C_{22} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

lineare inhomogene Gleichungssysteme:

$$\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \end{array}$$
$$\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 1 \end{array}$$

$$\begin{aligned} c_{11} &= \frac{1}{2} \\ c_{12} &= \frac{1}{2} \\ c_{21} &= \frac{1}{2} \\ c_{22} &= -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

Damit:

$$C = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Inverse Transformationsmatrix: statt Konventioneller Matrixversion $\rightarrow$ ($\sqrt{2}C$) ist orthogonale Matrix, C ist symmetrisch.

$$C = \tilde{C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\tilde{\sqrt{2}C} \right) \tilde{C} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{2}C \right)^{-1} = \frac{1}{2} C^{-1}$$

Damit $C^{-1} = 2C$
Komponentandarstellung eines Vektors in
alter Basis $\vec{a} = (5, -2)$
neuer Basis $\vec{a'} = C^{-1}\vec{a} = \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \end{pmatrix}$
Kontrolle: $\vec{a} = C\vec{a'} = \begin{pmatrix} 5 \\ -2 \end{pmatrix}$
Matrixdarstellung eines Operators

1.10 Das Eigenwertproblem

1.10.1 Hermitsche Matrix

Es gilt:

$$A = A^{+} = \tilde{A}^{*} \text{ bzw. } A_{ij} = A^{*}_{ji}$$

Bedeutung in der Quantenmechanik:
Hermitsche Operatoren für die Messung, deren Eigenwerte sind mögliche Messwerte und müssen damit reell sein.
Satz:

$$\langle x | A_y \rangle = \langle A_x | y \rangle$$

Beweis:

$$\langle x|A_y\rangle = \text{ Komponentendarstellunf in VONS } = \sum_i x_i \left(\sum_j A_{ij}y_j\right) = \sum_{ij} A^*_{ji}x^*_i y_j$$
$$= \sum_j \left(\sum_i A^*_{ji}x^*_i\right) y_j = \langle Ax|y\rangle$$

α) Die Eigenwerte einer hermitschen Matrix sind reel:
Eigenwertproblem:

$$A|x_i\rangle = \lambda_i|x_i\rangle$$

Skalarprodukt mit $\langle x_i|$

$$\langle x_i|Ax_i\rangle = \lambda_i\langle x_i|x_i\rangle$$

Konjugiert:

$$\langle Ax_i|x_i\rangle = \lambda^*_i\langle x_i|x_i\rangle$$
$$\text{Allgemein: } \langle a|b\rangle^* = \langle b|a\rangle$$
$$\left(\sum_i a^*_i b_i\right)^* = \left(\sum_i b^*_i a_i\right) \text{ in VONS}$$

Differenzbildung:

$$\underbrace{\langle x_i|A_{xi}\rangle - \langle A_{xi}|x_i\rangle}_{=0 \text{ Wie oben bewiesen, }} = \underbrace{(\lambda_i - \lambda^*_i)}_{\text{reell }} \underbrace{\langle x_i|x_i\rangle}_{\neq 0 \text{für } |x_i\rangle \neq |0\rangle}$$

$\Rightarrow$ Es muss immer gelten $\lambda_i = \lambda^*_i$ bzw. $\mathrm{lm}(\lambda_i) = 0$
β) Die Eigenvektoren einer hermiteschen Matrix sind orthogonal, wenn sie zu verschiedenen Eigenwerten gehören. Eigenwertproblem:

$$A|x_i\rangle = \lambda|x_i\rangle \text{ und } A|x_j\rangle = \lambda_j|x_j\rangle$$

Skalarprodukt mit

$$\langle x_j| \text{ bzw. } \langle x_i| :$$
$$\langle x_j|Ax_i\rangle = \lambda_i\langle x_j|x_i\rangle\langle x_i|Ax_j\rangle = \lambda_j\langle x_i|x_j\rangle$$

Konjugiert Komplexes:

$$\langle Ax_i|x_j\rangle = \lambda_i\langle x_i|x_j\rangle$$

A hermitisch:

$$\langle x_i|Ax_j\rangle = \lambda_i\langle x_i|x_j\rangle$$
$$0 = (\lambda_i - \lambda_j)\langle x_i|x_j\rangle$$

Differenzbildung: $\Rightarrow$ für $\lambda_i \neq \lambda_j$ muss gelten $\langle x_i|x_j\rangle = 0$
γ) Die Eigenvektoren einer hermiteschen Matrix können orthogonalisiert werden, falls sie zum gleichen Eigenwert gehören.

$$\lambda_i = \lambda_j = \lambda$$
$$A|x_i\rangle = \lambda|x_i\rangle \text{ und } A|x_j\rangle = \lambda|x_j\rangle$$

Linearkombination:

$$A\left(c_i|x_i\rangle + c_j|x_j\rangle\right) = \lambda\left(c_i|x_i\rangle + c_i|x_j\rangle\right)$$

c_i, c_j können zum Beispiel durch Schmidtsches Orthogonalisierungsverfahren bestimmt werden.

Kommutierende Matrizen haben gemeinsame Eigenvektoren.
Es gelte $[A, B] = 0$ sowie $A\vec{x} = \lambda\vec{x}$
Multiplikation von links mit B:

$$B(a\vec{x}) = B(\lambda\vec{x})$$

B ist ein linearer Operator und A kommutiert mit B:

$$A(B\vec{x}) = \lambda(B\vec{xz})$$

$\Rightarrow (B\vec{x})$ ist Eigenvektor von A zum Eigenwert λ
Falls keine zusammenfallenden Eigenwerte vorliegen, muss gelten $(B\vec{x}||\vec{x})$ bzw. $B\vec{x} = \mu\vec{x}$
$\Rightarrow \vec{x}$ ist Eigenvektor von B zum Eigenwert μ
$\vec{x}$ kann Eigenvektor zu verschiedenen Operatoren sein.

1.10.2 Die Eigenvektoren als Basissystem, Hauptachsentransformation

Die Eigenschaften einer hermiteschen Matrix $A = A^+$ bilden ein Orthonormalsystem, die Transformation in das System der Eigenvektoren von A heißt Hauptachsentransformation
$C^{-1}AC$ ist eine Diagonalmatrix mit den Eigenwerten von A als Diagonalelement, Transformationsmatrix C ist unitär, d.h. $C^{-1} = C^+$.
Eigenwertproblem:

$$A|x_i\rangle = \lambda_i|x_i\rangle$$

Transformationsmatrix:

$$C = \begin{pmatrix} |x_1\rangle & |x_2\rangle & \dots & |x_n\rangle \end{pmatrix}$$

Jedes x_k ist ein Spaltenvektor!!!

$$C{-1} = C^+ = \begin{pmatrix} \langle x_1 \\ \langle x_2| \\ \vdots \\ \langle x_n| \end{pmatrix}$$

wobei hier x_k ein Zeilenvektor ist.
Basistransformation:

$$\begin{aligned} A' &= C^{-1}AC \\ &= \begin{pmatrix} \langle x_1 \\ \langle x_2| \\ \vdots \\ \langle x_n| \end{pmatrix} A \begin{pmatrix} |x_1\rangle & |x_2\rangle & \dots & |x_n\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle x_1 \\ \langle x_2| \\ \vdots \\ \langle x_n| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\lambda_1 x_1\rangle & |\lambda_2 x_2\rangle & \dots & |\lambda_n x_n\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \lambda_n \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Beispiel: Berehcnung von A^α (A sei symmetrische Matrix, $A = \tilde{A}$)

$$A \xrightarrow{\text{Hauptachsentransformation}} A' \text{ diagonal} \xrightarrow{\text{Potenzieren}} A'^\alpha \text{ diagonal} \xrightarrow{\text{Rücktransformation}} A^\alpha$$

Konkret:

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

gesucht: $A^{-\frac{1}{2}}$

1. Eigenwerte, Eigenvektor von A
$\begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0$
$\lambda 1,2 = \frac{4+\sqrt{16-12}}{2}$, $\lambda_1 = 3$, $\lambda_2 = 1$
$\lambda_1 = 3 \rightarrow \begin{array}{cc|c} -1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \end{array} \rightarrow \hat{x_1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,1)$
$\lambda_2 = 1 \rightarrow \begin{array}{cc|c} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \end{array} \rightarrow \hat{x_2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1,-1)$

2.Haupttransformation: $A' = C^{-1}AC$
hier $C^{-1} = \tilde{C}$ da orthogonale Matrix

$$A' = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 3 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 6 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

3.Potenzieren

$$A'^{-\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} 3^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & 1^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

4.Rücktransformation $A^{-\frac{1}{2}} = CA'^{-\frac{1}{2}}C^{-1}$

$$A^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}}+1 & \frac{1}{\sqrt{3}}-1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}}-1 & \frac{1}{\sqrt{3}}+1 \end{pmatrix}$$

2 Differentialgleichungen

2.1 Allgemeines

- DGLs sind schwierig zu lösen un im Allgemeinen nicht Schulstoff
- Anwendung in allen Bereichen der Naturwissenschaften sowie Ingenieurs- und Wirtschaftswissenschaften

Eingangsbeispiel: Chemische Reaktion 1.Ordnung (monomolekularer Zerfall)

$$\mathrm{A} \longrightarrow \mathrm{B} + \mathrm{C}$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Molekül A zefällt, sei unabhängig davon, wie lange es schon existiert und wieviele andere Moleküle A in der Nähe sind. (Keine gegenseitige Beeinflussung). Dann gilt:

$$D = k \cdot N \cdot \Delta t$$

D ist die Anzahl der Zerfälle N die Anzahl von A Molekülen "Je mehr As da sind, desto mehr kann zerfallen." Δt ist der Beobachtungszeitraum "Je länger zugesehen wird, desto mehr Zerfälle können beobachtet werden." k ist eine Proportionalitätskonstante. Der Zefall reduziert aber N, also ist $D = -\Delta N$

$$-\Delta N = kN\Delta t$$
$$\frac{\Delta N}{\Delta t} = -kN$$

Wir wollen aber keine Beschreibung, die nur an diskreten Punkten in der Zeit gilt, sondern eine kontinuierliche
→ Übergang von Δt zu dt

$$\Rightarrow \frac{dN}{dt} = -kN \text{ Differentialgleichung / DGl}$$

Diese DGL beschreibt implizit eine Funktion $N(t)$!
Lösung der DGL $\hat{=}$ Auffinden eines $N(t)$, das dieser DGL genügt.
Hier:

$$\underbrace{N(t) = N_0 e^{-kt}}_{\text{Exponentieller Zerfall}}$$

Differentialgleichung: eine Gleichung zwischen einer Funktion, ihren Ableitungen sowie einer oder mehrerer Variablen.
Gesucht ist die Funktion = Lösung oder Integral der DGL

Für die erfolgreiche Lösung ganz wichtig: DGLs korrekt klassifizieren können. DIe meisten Lösungsverfahren arbeiten in gegebener Weise nur für bestimmte DGL-Typen. - Nomenklatur nötig!

- <u>Eine</u> unabhängige Variable
  $y = y(x)$
  $y' = \frac{dy}{dx}$
  $\Rightarrow$ gewöhnliche DIfferentialgleichung n-Ordnung
  $F(x, y, y', \ldots, y(n)) = 0$
  Beispiele:
  $y'' - 5y = 0$
  $y^2(1 + y'^2) - 1 = 0$
- <u>Mehrere</u> unabhängige Variablen
  $y = y(x_1, x_2, x_3, \ldots, x_m)$
  $y_{x_i} = \frac{\partial y}{\partial x_i}, \ldots$
  $\Rightarrow$ partielle Differentialgleichungen

2.2 Gewöhnliche Differentialgleichungen 1.Ordnung

Allgemeine Form:

$$F(x, y, y') = 0$$

2.2.1 MEthode der Variablentrennung / Separation der Variablen

Kann angewandt werden, wenn $F(x, y, y') = 0$ umgeformt werden kann zu:

$$y' = \frac{dy}{dx} = f(x)g(y)$$

DIESER SCHRITT FUNKTIONIERT NICHT IMMER!

$$\frac{dy}{g(y)} = f(x)dx$$

$$\int \frac{dy}{g(y)} = \int f(x)dx$$

Beispiel: (vgl. Eingangsbeispiel)

$$\frac{1}{y} \cdot \frac{dy}{dx} = c$$

mit $c < 0$ ist das die übliche Formulierung einer Reaktion 1. Ordnung

$$\begin{aligned}
\frac{dy}{y} &= c\,dx \\
\int \frac{dy}{y} &= c \int dx \\
\ln y &= cx + \tilde{c} \text{ das ist die Integrationskonstante} \\
y &= e^{cx+\tilde{c}} \\
y &= e^{cx} \cdot e^{\tilde{c}} \\
y &= \tilde{\tilde{c}} e^{cx}
\end{aligned}$$

Satz: Die allgemeine Lösung einer gewöhnlichen DGL n-ter Ordnung enthält n freie Parameter (Integrationskonstanten)
Man unterscheidet bei der Bestimmung der freien Parameter (ergibt dann eine spezielle Lösung)
1) Anfangswertproblem:

$$\begin{aligned}
y(x_0) &= y_0 \\
y'(x_0) &= y_0' \\
&\vdots \\
y^{n-1}(x_0) &= y_0^{n-1}
\end{aligned}$$

2) Randwertprobleme: sorgegebenes Intervall $x \in [a, b]$ in dem die DGL gelöst werden soll und an dessen Rändern y bereits gegeben ist.

$$\begin{array}{cc}
y(a) = y_a & y(b) = y_b \\
y'(a) = y_a' & y'(b) = y_b' \\
\vdots & \vdots
\end{array}$$

Wenn DGL nicht separierbar, dann gegebenenfalls durch Umformung dahin bringen!
Ziel: Separierbare DGLs 1. Ordnung
a)

$$\begin{aligned}
y' &= f(\frac{y}{x}) \\
u &= \frac{y}{x}
\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}
y' &= f(ax + by + c) \\
u &= ax + by + c
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ DGL für $u = u(x)$ ist seperierbar
Beispiel:

$$\begin{aligned}
x^2y' - xy + y^2 &= 0 \text{ so nicht separierbar} \\
y' - \frac{y}{x} + \frac{y^2}{x^2} &= 0 \\
u &= \frac{y}{x} \text{ entspricht Fall a)} \\
\frac{du}{dx} = u' = y'x^{-1} - yx^{-2} &= \frac{y'}{x} - \frac{y}{x^2} \\
\Rightarrow y' &= xu' + u \\
xu' + u - u + u^2 &= 0 \\
-\frac{du}{u^2} &= \frac{dx}{x} \\
\frac{1}{u} &= \ln x + c \\
u(x) &= \frac{1}{\ln x + c} \\
\frac{y}{x} &= \frac{1}{\ln x + c} \\
y &= \frac{x}{\ln x + c}
\end{aligned}$$

c kann ggf. durch Anfangsbedingung bestimmt werden

Beispiel:

$$\begin{aligned}
y' &= (x+y)^2 \text{ so nicht separierbar} \\
u &= x + y \text{ Fall b)} \\
\frac{du}{dx} &= 1 + y' \\
y' &= u' - 1 \\
u' - 1 &= u^2 \\
\frac{du}{dx} &= u^2 + 1 \\
\frac{du}{u^2+1} &= dx \\
\int \frac{du}{u^2+1} &= \int dx \\
\arctan u &= x + c \\
u &= \tan(x+c) \\
y &= \tan(x+c) - x
\end{aligned}$$

2.2.2 Lineare Differentialgleichungen 1. Ordnung

Eine DGL heißt linear, wenn die unbekannte Funktion und ihre Ableitung nur in der ersten Potenz vorkommen und wenn keine Produkte dieser Größen auftauchen.
gewöhnliche DGL 1. Ordnung:

$$F(x, y, y') = 0$$

Spezialfall:
lineare DGL 1. Ordnung:

$$y' + f(x)y = g(x)$$

nicht separierbar für $f(x) \neq 0$ <u>und</u> $g(x) \neq 0$.

$$g(x) = 0 \text{ homogene DGL}$$
$$g(x) \neq 0 \text{ inhomogene DGL}$$

$g(x)$ ist nicht die "rechte Seite der Gleichung", sondern ein ggf. x-abhängiger Term, in dem werden y' noch y vorkommt. (wie bei linearen Gleichungssystemen)
Lösung der homogenen DGL: Separation der Variablen und Integration

$$\begin{aligned}
\frac{dy}{dx} f(x) y &= 0 \\
\int \frac{dy}{y} &= -\int f(x) dx \\
\ln y &= -\int f(x) dx + \tilde{c} \\
y_{ah} &= c e^{-\int f(x) dx} \\
&= c \cdot \bar{y_{ah}}
\end{aligned}$$

Lösung der inhomogenen DGL: Variation der Konstanten
Ansatz:

$$\begin{aligned}
y_{ai} &= c(x) \cdot \bar{y_{ah}} \\
y'_{ai} &= c'(x) \bar{y_{ah}} + c(x) \bar{y'_{ah}}
\end{aligned}$$

eingesetzt in: $y' + f(x) y = g(x)$

$$\begin{aligned}
c'(x) \bar{y_{ah}} + c(x) \bar{y'_{ah}} + f(x) c(x) \bar{y_{ah}} &= g(x) \\
c'(x) &= \frac{g(x)}{\bar{y_{ah}}} \\
c(x) &= \int \frac{g(x)}{\bar{y_{ah}}(x)} dx + \tilde{c} \\
&\vdots \\
&= y_{ah} + y_{pi}
\end{aligned}$$

Satz: Die allgemeine Lösung der inhomogenen DGL, y_{ai}, ist die SUmme aus der allgemeinen Lösung der homogenen DGL und einer speziellen / partikulären Lösung der inhomogenen DGL, y_{pi}:

$$y_{ai} = y_{ah} + y_{pi}$$