Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

ulm university universität uulm

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
David Mahlberg

Mathematik II für Chemie und Wirtschaftschemie

Vorlesung: Di 10-12, H16

Seminar: Fr 8-10, H1

Das Übungsblatt wird im Seminar am 20.07.2018 als Präsenzübung bearbeitet

Die Übungsblätter können von `http://www.uni-ulm.de/nawi/nawi-theochemie/lehre/` heruntergeladen werden.

Übungsblatt 14

1. Aufgabe: Lineares Gleichungssystem

Bestimmen Sie die Lösung $\vec{\boldsymbol{x}}$ des linearen Gleichungssystems $\boldsymbol{A}\vec{\boldsymbol{x}} = \vec{\boldsymbol{b}}$ mit

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 3 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 2 \end{pmatrix} \qquad \vec{\boldsymbol{b}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

a) Berechnen Sie die inverse Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}$ mit Hilfe der Adjunkten und bestimmen Sie damit $\vec{\boldsymbol{x}}$. Prüfen Sie das Ergebnis, indem Sie $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}$ ausrechnen.

b) Berechnen Sie die inverse Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}$ und den Vektor $\vec{\boldsymbol{x}}$, indem Sie die zusammengesetzte Matrix $(\boldsymbol{A}\vec{\boldsymbol{b}}\boldsymbol{E})$ durch geeignete Umformungen in die Matrix $(\boldsymbol{E}\vec{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A^{-1}})$ überführen.

2. Aufgabe: Lineares Gleichungssystem

Gegeben ist die Matrix A. Berechnen Sie eine orthogonale Matrix P, für die $\mathrm{P}^T\mathrm{AP}$ diagonal ist.

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

3. Aufgabe: Matrix-Diagonalisierung

Es sei

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

Geben Sie eine (reelle) orthogonale Matrix P an, für die P^TAP diagonal ist.

4. Aufgabe: Eigenwerte und Eigenvektoren

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

a) $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 8 & 1 \end{pmatrix}$ b) $\begin{pmatrix} 2 & 4 & 0 \\ 3 & 6 & 0 \\ 1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$ c) $\begin{pmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}$

5. Aufgabe: Eigenwerte und Eigenvektoren

Bestimmen Sie Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen:

$$\text{a)} \quad \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad\qquad \text{b)} \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

6. Aufgabe: Gram-Schmidt-Verfahren

Gegeben sind folgende Vektoren des $\mathbb{R}^4$:

$$\vec{a}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{a}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

Orthonormalisieren Sie $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ mit Hilfe des Gram-Schmidt-Verfahrens.