Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Daniela Künzel, Katrin Tonigold

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, O25/346

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

Übungsblatt 14, Übung am 5. 2. 2010

Aufgabe 1: *Diagonalisieren einer Matrix*

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

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

Aufgabe 2: *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 $P^T AP$ diagonal ist.

Aufgabe 3: *Cayley-Hamilton-Methode: Berechnen der inversen Matrix*

Berechnen Sie die Inverse der folgenden Matrix mit der Cayley-Hamilton-Methode.

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

Aufgabe 4: *Gerschgorin-Kreise*

Gegeben ist:

$$A = \begin{pmatrix} 5 & 0.3 & -0.1 & 0 \\ 0 & 0 & 0.2 & 0 \\ 1 & 0 & -2 & 0 \\ 0.5 & 0.1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

a) Zeichnen Sie für A die Gerschgorin-Kreise. Was kann über die Lage der Eigenwerte ausgesagt werden?
b) Können $\lambda = -1.5$ und $\lambda = 1$ Eigenwerte von A sein?

Aufgabe 5: *Jacobi-Verfahren*

Es sei

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

a) Zeichnen Sie die Gerschgorin-Kreise von A. Wie kann die Lage der Eigenwerte (ohne weitere Rechnung) weiter eingeschränkt werden?
b) Die Matrix soll nun mit der Jacobi-Methode diagonalisiert werden. Man wählt dazu

$$U_1 = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi & 0 \\ -\sin\phi & \cos\phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

und führt die Orthogonaltransformation $U_1^T AU_1$ durch. (ein Iterationsschritt genügt)
c) Zeichnen Sie Gerschgorin-Kreise für die nach dem 1. Iterationsschritt erhaltene Matrix.
d) Berechnen Sie zur Kontrolle die Eigenwerte von A analytisch über das charakteristische Polynom.