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 11, Übung am 28. 1. 2011

Aufgabe 1: *Inverse Matrix*

Gegeben ist die folgende Matrix:

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

Berechnen Sie die inverse Matrix mit dem (Gauss-Jordan)-Eliminierungsverfahren.

Aufgabe 2: *Lineares Gleichungssystem: Lösen durch inverse Matrix*

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

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

a) Berechnen Sie die inverse Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}$ mit Hilfe der Adjunkten und bestimmen Sie damit $\vec{x}$. Prüfen Sie das Ergebnis, indem Sie $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}$ ausrechnen.
b) Berechnen Sie die inverse Matrix $\boldsymbol{A}^{-1}$ und den Vektor $\vec{x}$, indem Sie die zusammengesetzte Matrix $(\boldsymbol{A}\vec{b}\boldsymbol{E})$ durch geeignete Umformungen in die Matrix $(\boldsymbol{E}\vec{x}\boldsymbol{A}^{-1})$ überführen.

Aufgabe 3: *Gleichungssysteme*

Bestimmen Sie für die Reaktion

$$a\,HCl \;+\; b\,KMnO_4 \;+\; c\,H_3AsO_3 \;\rightleftharpoons\; d\,H_3AsO_4 \;+\; e\,MnCl_2 \;+\; f\,KCl \;+\; g\,H_2O$$

die stöchiometrischen Koeffizienten $a, b, ..., g$, indem Sie für jedes Element die Erhaltungsgleichung aufstellen und so zu einem linearen Gleichungssystem kommen. Die Koeffizienten sollen ganze Zahlen sein.

Aufgabe 4: *Lineares Gleichungssystem: Gauss-Jordan*

Lösen Sie folgendes Gleichungssystem mit dem Gauss-Jordan-Verfahren:

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 4 \\ 2x_1 + 3x_2 + 0x_3 &= 1 \\ 3x_1 + 4x_2 + x_3 &= 2 \end{aligned}$$

Aufgabe 5: *Lineare Gleichungssysteme: Existenz von Lösungen*

Untersuchen Sie, ob die folgenden Gleichungssysteme eine, keine oder unendlich viele Lösungen besitzen. Formen Sie dazu die Gleichungssysteme nach dem Gaußschen Eliminierungsverfahren um. Geben Sie die Lösung an, falls sie existiert.

$$\text{a)} \quad \begin{aligned} 2x + 2y - z &= 0 \\ 2x - y + z &= 1 \\ 6x + 3y - z &= 2 \end{aligned} \qquad \text{b)} \quad \begin{aligned} 2x + y + z &= 1 \\ 4x + y + 2z &= 0 \\ 2x + z &= -1 \end{aligned} \qquad \text{c)} \quad \begin{aligned} 2x + 8y + 3z &= 2 \\ -2x + 4y - z &= 0 \\ 2x + y + 2z &= 1 \end{aligned}$$