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 13, Übung am 11. 2. 2011

Aufgabe 1: *Gram-Schmidt-Orthogonalisierung*

Gesucht ist eine Orthonormalbasis für den von den Vektoren $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ aufgespannten Unterraum des $\mathbb{C}^4$:

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

Hinweise:
1.) Eine Basis eines (Unter-)Vektorraums ist eine Menge linear unabhängigen Vektoren, mit denen jeder beliebige Vektor dieses Vektorraums erzeugt werden kann.
2.) Da es sich um komplexe Vektoren handelt, muss man die komplexe Form des Skalarprodukts verwenden: $\alpha_{ij} = -\vec{y}_j^\dagger \vec{x}_i$

Aufgabe 2: *Cayley-Hamilton-Methode: Berechnen der inversen Matrix*

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

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -3 & 4 \\ 1 & -3 & 0 \\ 1 & -5 & -1 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 3: *Gerschgorin-Kreise*

Gegeben ist:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0.1 & -0.1 \\ 0 & 2 & 0.4 \\ -0.2 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

a) Zeichnen Sie für A die Gerschgorin-Kreise.
b) Da A^T dieselben Eigenwerte hat wie A, kann man zusätzliche Informationen aus den Gerschgorin-Kreisen von A^T erhalten. Zeichnen Sie die Gerschgorin-Kreise von A^T.
c) Kombinieren Sie die Informationen über die Lage der Eigenwerte aus a) und b) in einem weiteren Schaubild. In welchen Intervallen liegen wieviele Eigenwerte?

Aufgabe 4: *Jacobi-Verfahren*

Es sei

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 4 & 0 \\ 4 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

a) Zeichnen Sie die Gerschgorin-Kreise von A.
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 $U_1^T A U_1$ 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.