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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H7, N24/226

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

Übungsblatt 14, Übung am 10. 02. 2012

Aufgabe 1: *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.

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

Aufgabe 2: *Eigenwerte*

Es sei A eine quadratische (4×4) Matrix mit dem charakteristischen Polynom

$$P_4(\lambda) = 2\lambda^4 + 42\lambda^3 - 5\lambda^2 + \lambda$$

Ist A invertierbar?

Aufgabe 3: *Eigenwerte und Eigenvektoren*

Geben Sie für die folgenden Matritzen die Eigenwerte und Eigenvektoren an.

$$\textbf{(a)} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -6 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 4 \end{pmatrix} \qquad \textbf{(b)} \begin{pmatrix} 1 & -3 & 3 \\ 3 & -5 & 3 \\ 6 & -6 & 4 \end{pmatrix}$$

Hinweis: In Aufgabenteil (b) liegt ein Eigenwert mit zweifacher Vielfachheit vor. Der Raum, der von der Linearkombination der zugehörigen Eigenvektoren aufgespannt wird, ist also zweidimensional. Daher ist die konkrete Wahl der zugehörigen Eigenvektoren nicht eindeutig. Sie müssen nur immer den gleichen Raum aufspannen. Orthonormalisieren Sie die beiden Vektoren, wenn nötig.

Aufgabe 4: *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 5: *Cayley-Hamilton-Methode: Berechnen der inversen Matrix*

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

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