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

Mathematische Methoden III für Chemie und Wirtschaftschemie

Fr. 10:15 Uhr, H9, O28/2004, O25/346

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

Übungsblatt 13, verteilt am 23. 1. 2009, Übung am 30. 1. 2009

Aufgabe 1: *Diagonalisieren einer Matrix*

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

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 2: *Matrix-Diagonalisierung*

Es sei

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

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.

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

Hinweis: Zur Kontrolle des Ergebnisses siehe Blatt 10.

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: *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 $U_1^T AU_1$ 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.