

## 6. Übungsblatt "Numerische Methoden in der Chemie" SoSe 2017

12. Juni 2017

- 1) Ermitteln Sie die Eigenwerte und Eigenvektoren der folgenden Matrizen.

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \mathcal{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$
$$\mathcal{C} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \quad \mathcal{D} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \\ 3 & 3 & 6 \end{pmatrix}$$

Für welche  $\alpha$  sind die Eigenwerte von  $\mathcal{C}$  entartet? Zeigen Sie, dass die Matrix  $\mathcal{C}$  orthogonal ist.

- 2) Gegeben sei die Funktion  $f(x, y, z) = \frac{xy}{z+1} e^{\sin(x)}$ .
- Berechnen Sie den Gradient dieser Funktion.
  - Berechnen Sie die Hesse-Matrix von  $f(x, y, z)$ .

- 3) Gegeben sei die vektorwertige Funktion:

$$\vec{f}(x, y, z) = \begin{pmatrix} r(x, y, z) \\ \theta(x, y, z) \\ \phi(x, y, z) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \\ \arccos \frac{z}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \\ \arctan \frac{y}{x} \end{pmatrix}$$

Berechnen Sie ihre Jacobi-Matrix.