Klausur vom 09.07.2008 (SS 2008)
Mathematik II/III für Studierende der Chemie

Prof. Dr. Guido Germano

Vorname	Nachname
Geburtsdatum	Geburtsort
Matrikelnummer	Semester
Bachelor ☐	Diplom Mathe II ☐ Mathe III ☐

Aufgabe	1 (18)	2 (18)	3 (16)	4 (18)	5 (18)	6 (12)	Σ (100)
Punkte							

1. *(Alle)* Sei

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

   (a) Welche Eigenschaften hat die Matrix $\mathbf{A}$? Bestimmen Sie die Matrix der Eigenwerte $\mathbf{\Lambda}$ und die der Eigenvektoren $\mathbf{X}$. Testen Sie das Ergebnis durch die Äquivalenztransformation $\mathbf{A} = \mathbf{X\Lambda X}^\mathsf{T}$.

   (b) Wenn $\mathbf{\Lambda}$ die Hesse-Matrix in einem kritischen Punkt ist, ist dieser Punkt ein Maximum, ein Minimum oder ein Sattelpunkt? Begründen Sie kurz.

2. *(Mathe II Bachelor, Mathe III)* Sei

$$\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{3}-1 \\ -\sqrt{3}-1 \end{pmatrix}.$$

   (a) Zeigen Sie, dass die zwei Vektoren eine Basis von $\mathbb{R}^2$ bilden.

   (b) Berechnen Sie die Überlappungsmatrix $\mathbf{S}$. Welche Informationen kann man daraus erhalten?

   (c) Erklären Sie kurz, wie man mit Hilfe der Überlappungsmatrix die *symmetrische* Orthonormalisierung von Per-Olov Löwdin herleiten kann.

   (d) Die *kanonische* Orthonormalisierung ist eine Variante des symmetrischen Verfahrens, in dem statt $\mathbf{X\Lambda}^{-1/2}\mathbf{X}^\mathsf{T}$ nur $\mathbf{X\Lambda}^{-1/2}$ benutzt wird (siehe z.B. Szabo-Ostlund, "Modern Quantum Chemistry", S. 144). Erklären Sie, warum das ebenfalls funktioniert.

   (e) Orthonormalisieren Sie die Basis mit beiden Verfahren. *Hinweis: Sie können dabei Rechnungen aus Aufgabe 1 wiederverwenden.*

3. *(Mathe II Bachelor, Mathe III)* Betrachten Sie das lineare Gleichungssystem (LGS)

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 7 \end{pmatrix}.$$

   (a) Warum hat dieses LGS eine eindeutige Lösung?

   (b) Benutzen Sie Gauß-Jordan-Elimination mit partial Pivoting, um das LGS zu lösen und gleichzeitig die Inverse der Koeffizientenmatrix zu finden.

   (c) Testen Sie die Lösung des LGS durch Einsetzen.

   (d) Berechnen Sie die Inverse der Koeffizientenmatrix auch mit der Formel $\mathbf{A}^{-1} = \tilde{\mathbf{A}}^{\mathsf{T}} / \det \mathbf{A}$ und vergleichen Sie die Ergebnisse.

4. *(Mathe II)* Die Funktion

$$(u, v) = \mathbf{g}(x, y) = (x + y, y - x^2)$$

   führt die Menge $\mathbb{A}$ in $\bar{\mathbb{A}} = \mathbf{g}(\mathbb{A})$ über, mit

$$\begin{aligned} \mathbb{A} &= \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 < x < 2,\ 0 < y < 2 - x\} \\ \bar{\mathbb{A}} &= \{(u, v) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 < u < 2,\ -u^2 < v < u\}. \end{aligned}$$

   Zeichnen Sie $\mathbb{A}$ und $\bar{\mathbb{A}}$ und berechnen Sie die Oberfläche von $\bar{\mathbb{A}}$

   (a) direkt über das Doppelintegral $\int_{\bar{\mathbb{A}}} du dv$;

   (b) über das Doppelintegral $\int_{\mathbb{A}} f(x, y)\, dx dy$ einer geeigneten Funktion $f(x, y)$, die aus der Substitutionsformel für Mehrfachintegrale resultiert.

5. *(Mathe II)* Ein konstanter Strom, der durch einen entlang der z-Achse liegenden Draht fließt, erzeugt nach dem Gesetz von Biot und Savart ein Magnetfeld außerhalb des Drahtes, das bis auf eine Konstante durch

$$\mathbf{H}(x, y, z) = \frac{1}{x^2 + y^2} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

   gegeben ist.

   (a) Berechnen Sie die Jacobi-Matrix $\mathbf{J_H} = \partial(H_x, H_y, H_z)/\partial(x, y, z)$.

   (b) Berechnen Sie die Rotation $\nabla \times \mathbf{H}$.

   (c) Berechnen Sie die Arbeit über einen Kreis in der x, y-Ebene mit Radius R und Mitte im Ursprung.

   (d) Schließen Sie aus den Ergebnissen der vorherigen drei Fragen, ob das Magnetfeld konservativ ist.

6. *(Alle)* Lösen Sie das Anfangswertproblem

$$\begin{cases} y' = \sqrt{y}/(1 + x) \\ y(0) = 0. \end{cases}$$

2'. *(Mathe II Diplom)* Berechnen Sie den Gradienten, dessen Divergenz, das totale Differential und die kritischen Punkte der Funktion

$$f(x,y) = \arctan \frac{xy+1}{x+y}.$$

3'. *(Mathe II Diplom)* Skizzieren Sie den Integrationsbereich $\mathbb{A}$ und berechnen Sie das Doppelintegral:

$$\int_{\mathbb{A}} x \ln y \, dxdy, \quad \mathbb{A} = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid 0 \leq x \leq y+1, \ 1 \leq y \leq 2\}.$$

4'. *(Mathe III)* Lösen Sie das Anfangswertproblem

$$\begin{cases} y' \sin x - y \cos x = 4 \sin^4 x \\ y(0) = 0 \end{cases}$$

Um was für eine Differentialgleichung handelt es sich?

5'. *(Mathe III)* Lösen Sie die Gleichung

$$z^2 + (1+i)z - 2(1-i) = 0, \quad z \in \mathbb{C}.$$