FU Berlin: WiSe 2019/20 (Mathematik 2, Weber)

Übungszettel Nr. 7, Abgabe 03.12.2019 um 8:00 Uhr

Lernziele: Eigenwerte, Eigenvektoren, Hauptvektoren ausrechnen; Diagonalisierung; Distanzgeometrieproblem

---

Aufgabe 1: (Eigenwerte und Eigenvektoren ausrechnen)

Berechnen Sie die Eigenwerte und die zugehörigen Eigenvektoren der folgenden Matrix:

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

Tipp: Schauen Sie sich für die Berechnung der Eigenwerte Aufgabe 3 auf dem 6.Übungszettel an! Das aus der Determinante entstehende Polynom wird auch als *charakteristisches Polynom* bezeichnet. Seine Nullstellen sind die Eigenwerte der Matrix A. Für die Berechnung der Eigenvektoren setzen Sie in der in Aufgabe 6/3 gezeigten Matrix für λ die entsprechenden Eigenwerte ein und berechnen jeweils den Kern der somit entstehenden Matrix. (Die Basisvektoren des Kerns sind die Eigenvektoren.)

Aufgabe 2: (algebraische und geometrische Vielfachheit)

Betrachten Sie folgende drei Matrizen:

$$A_1 = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \qquad A_2 = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 1 \\ 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}, \qquad A_3 = \begin{pmatrix} 4 & 4 & 0 \\ 3 & 4 & 6 \\ 0 & -2 & 4 \end{pmatrix}.$$

a) Zeigen Sie, dass alle drei Matrizen das charakteristische Polynom $(4-\lambda)^3$ haben. (Hinweis: Schauen Sie in Aufgabe 1, wie das charakteristische Polynom gebildet wird.)

In Aufgabenteil a) hat sich gezeigt, dass die Nullstelle 4 die Vielfachheit 3 hat (Man findet 3 Mal die Nullstelle 4, wenn man diese jeweils durch Polynomdivision oder mittels Horner-Schema abdividiert). Diese Vielfachheit wird als *algebraische Vielfachheit* des Eigenwertes bezeichnet.

b) Um die Eigenvektoren zum Eigenwert 4 zu bestimmen, muss (analog zu Aufgabe 1) der Kern der Matrix $(A-4I)$ ermittelt werden, wobei I die dreidimensionale Einheitsmatrix ist. Machen Sie dieses für die obigen drei Matrizen.

Man erhält in den drei Fällen unterschiedlich viele Nullspalten im Bild-Kern-Algorithmus und daher unterschiedlich viele Basisvektoren für den Kern der Matrix.

Die Anzahl dieser Basisvektoren entspricht der *geometrischen Vielfachheit* des Eigenwertes.

Aufbage 3: (Diagonalisierung, Hauptvektoren)

Nur wenn die algebraischen und die geometrischen Vielfachheiten der Eigenwerte übereinstimmen, kann man die Matrix *diagonalisieren*. Dieses ist der Fall für die Matrix aus Aufgabe 1. Sei X die Matrix, die sich aus den drei Eigenvektoren (zu den verschiedenen Eigenwerten) von A ergibt.

a) Rechnen Sie für die Matrix A aus Aufgabe 1 folgendes aus: $X^{-1}AX$. Was fällt auf?

Stimmen algebraische und geometrische Vielfachheit nicht überein, dann lässt sich die Matrix nicht diagonalisieren. Dieses ist z.B. der Fall für die Matrix A_2 aus Aufgabe 2. Die zwei (Eigen)Vektoren

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

bilden den Kern der Matrix $(A - 4I)$. Es fehlt ein dritter Eigenvektor.

b) Bestimmen Sie mittels Kreuzprodukt zu den beiden gegebenen Vektoren einen orthogonalen (linear unabhängigen) dritten Vektor. Bilden Sie so wieder eine 3x3-Matrix X und das Produkt $X^{-1}AX$. Was ist anders als bei Teil a)?

Hinweis: Lesen Sie in der Literatur nach, was ein Hauptvektor (oder alternativ, was die Jordan'sche Normalform) ist!

Aufbage 4: (Distanzgeometrieproblem lösen)

Mit Hilfe von NMR-Experimenten ist es oft möglich, Informationen über die Distanzen zwischen bestimmten Atomen in dem zu untersuchenden Molekül zu gewinnen (NOE's). Die Aufgabe, aus diesen Distanzen auf die 3D-Koordinaten der Atome zurück zu rechnen, bezeichnet man als *Distanzgeometrie-Problem*. Im Allgemeinen sind solche Probleme mathematisch schwer zu lösen. Anders ist es jedoch, wenn alle paarweisen Distanzen der beteiligten Atome bekannt sind. Die Lösung geht dann folgendermaßen:

Nehmen wir an, die folgende Matrix enthält die paarweisen Distanzen von einem Molekül aus vier Atomen:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & 2 & \sqrt{3} & \sqrt{5} \\ 2 & 0 & \sqrt{11} & \sqrt{17} \\ \sqrt{3} & \sqrt{11} & 0 & \sqrt{6} \\ \sqrt{5} & \sqrt{17} & \sqrt{6} & 0 \end{pmatrix}.$$

Distanzmatrizen sind auf jeden Fall nicht-negativ und symmetrisch. Die Diagonalelemente sind auf jeden Fall Null. Zunächst quadriert man alle Elemente dieser Matrix und kommt so zu der Matrix

$$\widehat{D} = \begin{pmatrix} 0 & 4 & 3 & 5 \\ 4 & 0 & 11 & 17 \\ 3 & 11 & 0 & 6 \\ 5 & 17 & 6 & 0 \end{pmatrix}.$$

Aus dieser Matrix gewinnt man eine andere Matrix M auf folgende Weise:

$$M_{ij} = \frac{\widehat{D}_{1j} + \widehat{D}_{i1} - \widehat{D}_{ij}}{2}, \qquad (*)$$

also die symmetrische Matrix

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & -2 & -4 \\ 0 & -2 & 3 & 1 \\ 0 & -4 & 1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Von dieser Matrix berechnet man alle positiven Eigenwerte (es sind drei, einer ist "0") und die dazugehörigen (drei) Eigenvektoren. Das Eigenwert-Problem hat bei dieser Methode immer drei positive Eigenwerte, egal wie viele Atome es sind (sofern es sinnvolle 3D-Koordinaten gibt, die das Distanzgeometrie-Problem lösen). Jetzt bedarf es noch einer Skalierung...

a) Machen Sie sich zunächst klar, dass die M-Matrix gemäß $(*)$ korrekt ausgerechnet wurde.

b) Suchen Sie eine Möglichkeit, das Eigenwert-Problem mit dem Rechner zu lösen. Da die Matrix M symmetrisch ist, bilden die Eigenvektoren ein Orthonormalsystem und die Eigenwerte sind reell. Beachten Sie, dass Ihre Lösung auch diese Eigenschaft hat (evtl müssen Sie die Eigenvektoren auf Länge 1 normieren)!

c) Multiplizieren Sie nun jeden Eigenvektor mit der Wurzel aus dem zugehörigen Eigenwert. Sie erhalten so eine Matrix von drei skalierten vier-dimensionalen Spalten-Eigenvektoren. Die (vier) Zeilen dieser Matrix sind die gesuchten 3-dimensionalen Koordinaten der Atome. Machen Sie die Probe, ob die vorgegebenen Distanzen eingehalten werden!

Hinweis: Warum funktioniert dieses Verfahren? Die Begründung für dieses Verfahren finden Sie auf dieser Webseite.

Viel Erfolg!