

Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Christian Carbogno, Sebastian Schnur

Mathematische Methoden II für Biochemie und Molekulare Medizin

Biochemie: Mi. 14:00 c.t., H9 — Molekulare Medizin: Mi. 14:00 c.t., H8

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

Übungsblatt 3, verteilt am 30. 4. 2008, Übung am 7. 5. 2008

Aufgabe 1: Newton-Verfahren

Das Newton-Verfahren ist eine numerische Methode um Nullstellen nichtlinearer Polynome zu bestimmen, z.B. $x^5 - 7x + 2 = 0$. Man verwendet dabei die Taylorsche Formel und entwickelt $f(x)$ an einer Stelle a , d.h. $f(x) = f(a) + f'(a)(x - a)$.

Nun löst man das linearisierte Nullstellen-Problem:

$$0 = f(a) + f'(a)(x - a) \quad (\text{leicht!}) \quad \Rightarrow \quad x = a - \frac{f(a)}{f'(a)}.$$

x ist im Allgemeinen eine bessere Näherung als a (Skizze).

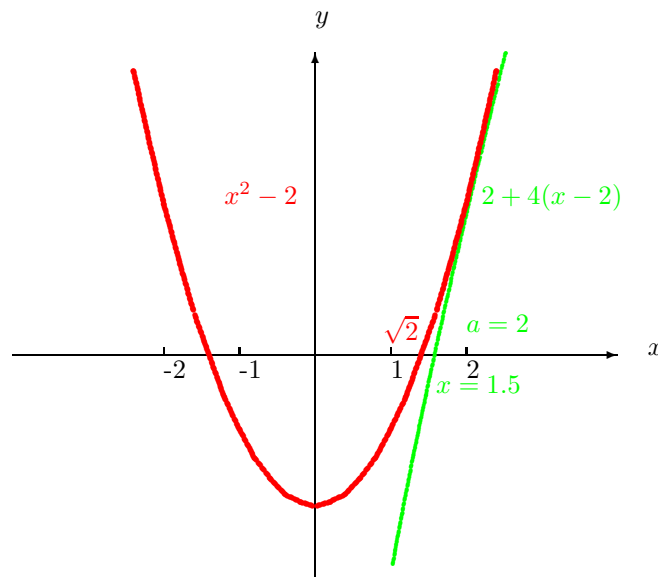
Newton-Verfahren:

$$x_0 := a, \quad x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

So kann man iterativ ($x_0 \Rightarrow x_1 \Rightarrow x_2 \Rightarrow x_3 \dots$) immer genauere Lösungen für das Nullstellen-Problem finden. Berechnen sie mit dem Newton-Verfahren in 3 Iterationsschritten (d.h. x_3) die Nullstellen von:

$$f(x) = x^2 + x - 1$$

Starten sie einmal mit $x_0 = -1$, einmal mit $x_0 = 0$ und einmal mit $x_0 = \frac{3}{4}$. Skizzieren sie die Funktion $f(x)$. Berechnen sie das Ergebnis $f(x) = 0$ mit Mitternachtsformel und Taschenrechner und vergleichen sie die Ergebnisse.



Aufgabe 2: Höhenlinien

Gegeben sei $Z = f(x, y) = y^3 - xy + x$. Durch welche Kurvenform wird die Höhenlinie $Z = 1$ dargestellt? Skizzieren Sie die Höhenlinie.

Aufgabe 3: Höhenlinien und Optimierung

Zeichnen sie die Höhenlinien der Funktion $f(x, y) = x + 2y$. Zeichnen sie den Einheitskreis in ihre Zeichnung ein. Bestimmen sie nun graphisch ungefähr das Maximum der Funktion $f(x, y)$ auf dem Einheitskreis, d.h. $\max(x + 2y)$ mit $x^2 + y^2 \leq 1$.