



Institut für Theoretische Chemie:
Prof. Dr. Gerhard Taubmann, Dipl.-Chem. Uwe Friedel
Mathematik I für Chemie und Wirtschaftschemie

Di, 8:00-10:00 Uhr, O25/346, O27/123

Di, 14:00-16:00, O25/H7

Do, 12:00-14:00, N25/H9, O25/346

Übungsblatt 14,* Übung am 5. und 7.2.2013

Aufgabe 1: *Newton-Raphson-Verfahren*

Berechnen Sie analytisch die Nullstellen der Funktion

$$y = x^2 + x - 1$$

Eine der Nullstellen ist positiv. Berechnen Sie den numerischen Wert dieser Nullstelle $x_2 > 0$ mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Hinweis: Verwenden Sie einen Taschenrechner.

Berechnen Sie aus diesem Wert ohne größere Rechnung – ein Taschenrechner ist dazu nicht nötig – den numerischen Wert für $\sqrt{5}$.

Aufgabe 2: *Newton-Raphson-Verfahren*

Berechnen Sie π mit dem Newton-Raphson-Verfahren. Hinweis: Benutzen Sie $\sin x$ und verwenden Sie einen Taschenrechner.

Aufgabe 3: *Zerlegung von Funktionen*

Eine Funktion $f(x)$, die für $x \in \mathbb{R}$ definiert ist, lässt sich als Summe einer geraden Funktion $g(x) = \frac{1}{2} [f(x) + f(-x)]$ und einer ungeraden Funktion $u(x) = \frac{1}{2} [f(x) - f(-x)]$ schreiben:

$$f(x) = g(x) + u(x) = \frac{1}{2} [f(x) + f(-x)] + \frac{1}{2} [f(x) - f(-x)]$$

Zerlegen Sie folgende Funktionen in geraden und ungeraden Anteil:

- (a) $f(x) = x^5 - x^3 + 2x^2 - 1$
- (b) $g(x) = \sin^2 x + \sin x + \cos\left(x + \frac{\pi}{2}\right) + \tan \frac{\pi}{2}$
- (c) $h(x) = \sqrt{1 - x^2}$
- (d) $k(x) = \sqrt{x + 2}$

Lässt sich $k(x)$ tatsächlich in einen geraden und ungeraden Anteil zerlegen? Skizzieren Sie $k(x)$ und die beiden berechneten Teilfunktionen. Begründen Sie Ihre Antwort anhand der Skizzen.

$f(x)$ hat eine Nullstelle in der Nähe von $x = -1$. Berechnen Sie diese Nullstelle näherungsweise.

Aufgabe 4: *Vorlesung*

Beantworten Sie die Frage aus der Vorlesung.