

## 9. Übungsblatt “Numerische Methoden in der Chemie” SoSe 2017

---

3. Juli 2017

1) Gegeben ist die Ableitung einer Funktion:

$$f'(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-x^2)$$

Ausserdem gilt:  $f(0) = 0$

Berechnen Sie mit Hilfe der Taylorentwicklung (Stützstelle  $x_0 = 0$ )  $f(0.1)$ . Wieviele Summanden sind nötig, um den Wert von  $f(0.1)$  mit einer Genauigkeit von  $10^{-5}$  (bis zur 5. Nachkommastelle genau) zu berechnen?

2) Untersuchen Sie die Funktion

$$f(x, y) = (x - 6)^2 + (x + 2)y^2 + 10$$

auf stationäre Punkte und Extremwerte!

3) Gegeben sei die Funktion

$$f(x, y, z) = e^x \left( x^2 + y^2 + z^2 + \frac{3}{4} \right).$$

a) Untersuchen Sie die Funktion auf Extremstellen!

b) Hat die Funktion globale Extrema?

c) Ermitteln Sie den größten und den kleinsten Wert der Funktion über dem Würfel  $\{(x, y, z) : |x| \leq 1, |y| \leq 1, |z| \leq 1\}$ !

4) Mit folgenden Messpunkten soll eine lineare Regression durchgeführt werden.

a) (1,1), (2,2), (3,3), (4,4)

b) (0,1.66), (-1.2,0), (2.87,32.12), (2.3, 19.85), (-2.73, -16.95)