Prof. Dr. Frank Noé
Dr. Christoph Wehmeyer
Tutoren:
Katharina Colditz; Anna Dittus;
Felix Mann; Christopher Pütz

Klausur
Computerorientierte Mathematik I

13. Februar 2015

Beginn: 12:15 Uhr, Abgabe: 13:45 Uhr

`http://www.mi.fu-berlin.de/w/CompMolBio/ComaI`

Aufgabe 1 *(Matlab-Code, 8P)*:

a) *(5P)* Erklären Sie, was die folgende Matlab-Funktion tut. Erklären Sie kurz die einzelnen Schritte der Funktion und beschreiben Sie die Eingaben und Rückgaben.

```
function [A] = SomeFunction(A, k)
n = size(A,1);

k0 = k;
for m = k+1:n
    if abs(A(m,k)) > abs(A(k0,k))
        k0 = m;
    end
end

ex_row = A(k0,:);
A(k0,:) = A(k,:);
A(k,:) = ex_row;

end
```

b) *(3P)* In welchem Ihnen bekannten Algorithmus können Sie diese Funktion verwenden? Zu welchem Zweck?

Lösung

a) Der Funktion wird eine $n \times n$-Matrix A und eine natürlich Zahl $k \leq n$ übergeben. *(1P)* Zunächst wird die Dimension der Matrix bestimmt. *(1P)* Anschließend wird diejenige Zeile $k \leq k_0 \leq n$ bestimmt, die das betragsmäßig

größte Element in der k-ten Spalte zwischen der k-ten und n-ten Zeile enthält. *(1P)* Schließlich wird die k-te Zeile mit der k_0-ten Zeile vertauscht. *(1P)* Die so veränderte Matrix wird zurückgegeben. *(1P)*
b) Dieses Verfahren heißt Spaltenpivotsuche und kann im Gauss-Algorithmus vor dem k-ten Eliminationsschritt angewendet werden. *(1P)* Die Pivotsuche garantiert die Durchführbarkeit des Gauss-Algorithmus, da so immer ein nicht verschwindendes Pivot-Element gefunden wird. *(1P)* Außerdem kann dadurch die Stabilität des Verfahrens verbessert werden. *(1P)*

Aufgabe 2 *(Richtig oder Falsch, 4P)*:

Sind die folgenden Aussagen richtig oder falsch? Begründen Sie kurz Ihre Antwort.
(i) *(1P)* Die Maschinengenauigkeit $\text{eps}(q, l)$ einer Gleitkommadarstellung $\mathbb{G}(q, l)$ zur Basis q mit Mantissenlänge l ist die kleinste positive Zahl, die sich exakt in $\mathbb{G}(q, l)$ repräsentieren lässt.
(ii) *(1P)* Die praktische Lösung eines gut konditionierten Problems ist mit jedem Algorithmus unbedenklich möglich, der Gesamtfehler ist proportional zur Kondition und zum Eingabefehler.
(iii) *(1P)* Die Anzahl der Schritte im Euklidischen Algortihmus zur Berechnung von $\text{ggT}(a, b)$, $a > b$ ist immer gleich $\log_\Phi(b)$. Dabei ist $\Phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ der goldene Schnitt.
(iv) *(1P)* Bei der Lösung eines linearen Gleichungssystems $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ entfällt der Großteil des Rechenaufwandes auf die Berechnung der LR-Zerlegung der Matrix A.

Lösung

(i) Nein, die Maschinengenauigkeit ist der maximale relative Rundungsfehler in $\mathbb{G}(q, l)$.
(ii) Nein, die Stabilität des Algorithmus geht ebenfalls in den Gesamtfehler ein.
(iii) Nein, die Anzahl der Schritte hängt von a und b ab. Es gibt nur eine obere Schranke für die Anzahl der benötigten Schritte, diese ist gleich $\log_\Phi(b) + 1$.
(iv) Ja, die LR-Zerlegung erfordert $\mathcal{O}(n^3)$ Operationen, alle weiteren Schritte sind in $\mathcal{O}(n^2)$ machbar.

Aufgabe 3 *(Rechenaufgabe I, 4P)*:

Berechnen Sie die LR-Faktorisierung der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ -4 & -5 & -7 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Lösung

$$
\begin{aligned}
L &= \begin{pmatrix} 1 & & \\ -2 & 1 & \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}, \\
R &= \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ & 1 & 1 \\ & & -1 \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

(je ein Punkt pro richtigem Rechenschritt, und ein Punkt für das Endergebnis).

Aufgabe 4 *(Rechenaufgabe II, 2P):*

Berechnen Sie den maximalen relativen Rundungsfehler in der Gleitkommadarstellung $\mathbb{G}(2,4)$.

Lösung

$$
\begin{aligned}
\mathrm{eps}(q,l) &= \frac{1}{2} q q^{-l} \\
&= 2^{-4} \\
&= \frac{1}{16}.
\end{aligned}
$$

Aufgabe 5 *(Halbwertszeit, 8P):*

Ein radioaktiver Zerfall wird oft durch ein Zerfallsgesetz

$$N_t = N_0 e^{-\lambda t}$$

modelliert. Dabei ist N_t die Anzahl der Teilchen zur Zeit t, N_0 die Teilchenzahl zu Beginn ($t = 0$), und $\lambda > 0$ eine Konstante. Die Halbwertszeit $t_{1/2}$ ist definiert als der Zeitraum, nachdem nur noch die Hälfte der ursprünglich vorhandenen Teilchen übrig ist. Diese ist unabhängig von N_0. Ist N_0 bekannt und wird N_t durch Messung zu einem späteren Zeitpunkt t ermittelt, so kann man die Halbwertszeit mittels der Formel

$$
\begin{aligned}
t_{1/2} &= \frac{t \cdot \log(2)}{\log(N_0) - \log(N_t)} \\
&= \frac{t \cdot \log(2)}{\log(\frac{N_0}{N_t})}
\end{aligned}
$$

berechnen.
a) *(3P)* Betrachten Sie $t_{1/2}$ als Funktion der gemessenen Teilchenzahl N_t (N_0, t fest). Berechnen Sie die absolute Kondition $\kappa_{abs}(N_t)$ von $t_{1/2}$ als Funktion von N_t.

b) *(5P)* Nehmen Sie folgende Messwerte an: $N_0 = 10^{10}$, $t = 1$, $N_t = 10^9$. Bestimmen Sie aus diesen Messwerten die Größenordnung (dafür dürfen Sie runden) der absoluten Kondition κ_{abs}. ($\log(2) \approx 0.7$, $(\log(10))^2 \approx 5.3$). Ist das Ergebnis auf 1% genau, wenn wir die Teilchenanzahl N_t mit einem Fehler $|\Delta N| \leq 10^7$ messen können?

Lösung

a)

$$\begin{aligned} \frac{d}{dN_t} t_{1/2} &= -\frac{t \cdot \log 2}{\left(\log(\frac{N_0}{N_t})\right)^2} \cdot \left(-\frac{1}{N_t}\right) \\ &= \frac{t \cdot \log 2}{\left(\log(\frac{N_0}{N_t})\right)^2 N_t}. \end{aligned}$$

(2P). Das ist auch der Wert für $\kappa_{abs}(N_t)$. *(1P)*.
b) Für die absolute Kondition erhalten wir *(2P)*:

$$\begin{aligned} \kappa_{abs} &= \frac{\log(2)}{\log(10)^2 \cdot 10^9} \\ &\approx \frac{0.7}{5.3 \cdot 10^9} \\ &\approx 10^{-1} \cdot 10^{-9} \\ &= 10^{-10}. \end{aligned}$$

Gemäß der Abschätzung *(2P)*

$$\begin{aligned} |\Delta t_{1/2}| &\leq \kappa_{abs} |\Delta N| \\ &\leq 10^{-10} 10^7 \\ &= 10^{-3} \end{aligned}$$

können wir den absoluten Fehler in der Halbwertszeit kontrollieren. Wir schätzen weiterhin die exakte Halbwertszeit ab durch:

$$\begin{aligned} t_{1/2} &= \frac{\log(2)}{\log(10)} \\ &\approx \frac{0.7}{2.3} \\ &\approx 0.3. \end{aligned}$$

Damit folgt, dass der relative Fehler unter 1% liegt *(1P)*:

$$\begin{aligned} \frac{|\Delta t_{1/2}|}{|t_{1/2}|} &\leq \frac{10^{-3}}{0.3} \\ &= \frac{1}{3} \cdot 10^{-2} \\ &< 10^{-2}. \end{aligned}$$