

# Mathematik für Chemiker I

(MNF-chem0102, MNF-chem0310)

*2. Fassung vom 5. Januar 2009 ,  
mit Erweiterungen/Verbesserungen vom 28. Juli 2014*

**Prof. Dr. Bernd Hartke**

Theoretische Chemie

Christian-Albrechts-Universität Kiel

Institut für Physikalische Chemie

Max-Eyth-Straße 2

Erdgeschoß, Raum 29

Tel.: 0431/880-2753

`hartke@pctc.uni-kiel.de`

`http://ravel.pctc.uni-kiel.de`

*Sprechstunde: nach Vereinbarung jederzeit!*

## **Inhalt und Gebrauch**

Die vorliegende Version dieses Skripts enthält alle wesentlichen Teile des zu dieser Veranstaltung gehörenden Stoffs sowie die wichtigsten Abbildungen und einige wenige Beispiele. Die mittlerweile nur noch wenigen Lücken befinden sich in Randbereichen des Stoffs (meist gekennzeichnet durch das Symbol ♣). Eine Vertiefung des Stoffs anhand zahlreicher Beispiele findet in der Vorlesung und in den Übungen statt.

Große Teile dieses Skripts basieren auf einem Skript zu einer ähnlichen Veranstaltung an der Universität Stuttgart (s.u. Danksagung). Einige weitere Teile sind diversen Lehrbüchern entnommen, vor allem den in den Literaturangaben genannten; diese Anleihen und Zitate sind nicht einzeln im laufenden Text kenntlich gemacht, um die Übersichtlichkeit zu erhalten. Lediglich einige wenige kleinere Abschnitte sowie Änderungen im logischen Aufbau stammen von mir selber.

Unabhängig vom derzeitigen Stand seiner Entstehung und Weiterentwicklung ist dieses Skript weder geeignet als Lehrbuchersatz, noch als Ersatz für den Besuch der Vorlesung und der Übungen. Insbesondere enthält es nur wenige detaillierte Herleitungen, Beweise, Beispiele oder Anwendungen. Das Skript liefert lediglich ein orientierendes Grundgerüst für die eigene Vorlesungsmitschrift und für das selbständige Vor- und Nacharbeiten des Stoffs anhand von Lehrbüchern.

## **Danksagung**

Dieses Skript basiert in Aufbau und Inhalt weitgehend auf der Vorlesung „Mathematik für Chemiker“ von Herrn Prof. Dr. Hermann Stoll (Universität Stuttgart), dem ich an dieser Stelle für die sehr angenehme Zusammenarbeit während vieler Jahre gemeinsamer Lehre dieses Fachs in Stuttgart danken möchte. Ebenso danke ich Herrn Prof. Dr. Michael Dolg (jetzt Universität Köln), dessen Fassung der Vorlagen von Herrn Stoll ich freundlicherweise verwenden durfte.

*Bernd Hartke*

## Literaturempfehlungen

### analytische Mathematik

- grundlegende Werke: Zahlreiche Bücher „Mathematik für Chemiker“, z.B.:
  - Zachmann et al., Wiley-VCH, 6. Auflage, 2007.
  - Brunner/Brück, Spektrum Akademischer Verlag (Springer), 2. Auflage, 2007.
  - Papula, Vieweg-Verlag, 10. Auflage, 2001.
  - Pavel/Winkler, Pearson Studium, 2007 (derzeit nicht lieferbar?)
  - Rösch, Springer-Verlag, 2007 (Nachdruck von 1993).
- spezielle Empfehlungen:
  - Norbert Herrmann: “Mathematik für Naturwissenschaftler: Was Sie im Bachelor wirklich brauchen und in der Schule nicht lernen”, Spektrum Akademischer Verlag (Springer), 2012: locker-ansprechender Stil; bringt aber nur etwas, wenn man es wirklich durcharbeitet; wiederholt keine Schulmathematik.
  - Dieter Röß: “Mathematik mit Simulationen lehren und lernen”, de Gruyter, 2011: 60 interaktive Mathe-Simulationen und 2000 Physik-Simulationen, zugänglich unter <http://mathesim.degruyter.de/jws/>.
- weiterführende Werke (z.T. auf Englisch):
  - Boas: „Mathematical Methods in the Physical Sciences“, Wiley, 3. Auflage, 2005.
  - Arfken: „Mathematical Methods for Physicists“, Academic Press, 6. Auflage, 2005.
  - Lyons: “All you wanted to know about mathematics but were afraid to ask – Mathematics for science students”, 2 Bände, Cambridge University Press, 1998.
  - Heuser: “Lehrbuch der Analysis”, 2 Bände, Vieweg-Teubner, 17./14.Auflage, 2009/2008.

### numerische Mathematik

- Press/Teukolsky/Vetterling: „Numerical Recipes“, Cambridge University Press, 3. Auflage, 2007.
- Stoer/Bulirsch: „Numerische Mathematik 1 & 2“, Springer-Verlag, 10./5. Auflage, 2007/2005.
- Deuffhard/Hohmann: “Numerische Mathematik”, 3 Bände, de Gruyter, 2008.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Grundbegriffe</b>	<b>1</b>
1.1	Zahlen . . . . .	1
1.2	Determinanten . . . . .	3
1.3	Rechentechniken . . . . .	4
1.3.1	Rechnen mit Summen- und Produktzeichen . . . . .	4
1.3.2	Rechnen mit Absolutbeträgen . . . . .	5
1.3.3	Rechnen mit Ungleichungen . . . . .	6
1.3.4	Rechnen mit komplexen Zahlen . . . . .	6
1.4	Beweistechniken . . . . .	11
1.5	Kombinatorik . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Vektoren I: Grundlagen</b>	<b>12</b>
2.1	Der Vektorbegriff . . . . .	12
2.2	Rechnen mit Vektoren, Teil 1 . . . . .	13
2.3	Rechnen mit Vektoren, Teil 2 . . . . .	14
2.3.1	Addition . . . . .	14
2.3.2	Multiplikation mit einem Skalar . . . . .	15
2.3.3	Subtraktion . . . . .	15
2.3.4	Skalarprodukt . . . . .	16
2.3.5	Vektorprodukt . . . . .	17
2.3.6	Spatprodukt . . . . .	18
2.4	Geometrische Anwendungen . . . . .	20
2.4.1	Geradengleichungen . . . . .	20
2.4.2	Ebenengleichungen . . . . .	21
2.4.3	Kugelgleichung . . . . .	23
2.4.4	Abstandsformeln . . . . .	23
<b>3</b>	<b>Funktionen</b>	<b>27</b>
3.1	Funktionsbegriff . . . . .	27
3.1.1	Elementare Eigenschaften von Funktionen . . . . .	28
3.1.2	Umkehrfunktion . . . . .	29
3.1.3	Ganze rationale Funktionen (Polynome) . . . . .	30
3.1.4	Gebrochen rationale Funktionen . . . . .	32

3.1.5	algebraische Funktionen . . . . .	34
3.1.6	transzendente Funktionen . . . . .	35
3.1.7	Funktionenklassen . . . . .	47
3.2	Parameterdarstellung von Funktionen . . . . .	47
<b>4</b>	<b>Differentialrechnung von Funktionen einer Veränderlicher</b>	<b>50</b>
4.1	Der Grenzwertbegriff . . . . .	50
4.1.1	Folgen . . . . .	50
4.1.2	Grenzwerte bei Funktionen . . . . .	50
4.1.3	Stetigkeit . . . . .	54
4.1.4	Ermittlung von Grenzwerten und Rechnen mit Grenzwerten . . . . .	54
4.2	Ableitung von Funktionen . . . . .	57
4.2.1	Differentialquotient . . . . .	57
4.2.2	Differentiationsregeln . . . . .	60
4.2.3	Ableitung elementarer Funktionen . . . . .	63
4.2.4	symbolische Ableitung auf dem Computer . . . . .	70
4.2.5	Differentiale, Fehlerrechnung . . . . .	70
4.2.6	Ableitungen höherer Ordnung . . . . .	71
4.3	unbestimmte Ausdrücke . . . . .	72
4.4	Taylorreihen . . . . .	75
4.4.1	Definition und Konvergenz . . . . .	76
4.4.2	Beispiele für Konstruktion und Konvergenzabschätzung . . . . .	79
4.4.3	Standardtaylorreihen . . . . .	83
4.4.4	Restglied . . . . .	84
4.5	Kurvendiskussion . . . . .	84
4.6	Numerische Differentiation . . . . .	84
4.6.1	numerische Zahlendarstellung . . . . .	84
4.6.2	numerische Differentiation . . . . .	85
4.7	komplexe Zahlen und Funktionen . . . . .	87
4.8	Numerische Suche nach Nullstellen und Extrema . . . . .	87
4.8.1	Suche nach Nullstellen . . . . .	87
4.8.2	Suche nach Extremwerten . . . . .	94

<b>5</b>	<b>Integralrechnung von Funktionen einer Veränderlicher</b>	<b>97</b>
5.1	bestimmtes Integral . . . . .	97
5.2	Stammfunktion, unbestimmtes Integral, Hauptsätze . . . . .	101
5.3	Integration elementarer Funktionen . . . . .	103
5.4	Integrationsregeln . . . . .	106
5.4.1	Integration durch Substitution . . . . .	106
5.4.2	partielle Integration . . . . .	109
5.4.3	Integration rationaler Funktionen . . . . .	110
5.4.4	Integration rationaler Funktionen mit zusammengesetztem Argument . . . . .	112
5.4.5	Integration durch Taylorentwicklung des Integranden . . . . .	114
5.5	Formel von Stirling . . . . .	115
5.6	Integration komplexer Funktionen . . . . .	115
5.7	uneigentliche Integrale . . . . .	115
5.7.1	Integrale mit unbeschränktem Integranden . . . . .	116
5.7.2	Integrale mit unbeschränktem Integrationsintervall . . . . .	117
5.8	spezielle Funktionen . . . . .	119
5.9	symbolische Integration . . . . .	121
5.10	Ableitung von Integralausdrücken . . . . .	121
5.10.1	obere Grenze ist Funktion von $x$ : . . . . .	122
5.10.2	untere Grenze ist Funktion von $x$ : . . . . .	122
5.10.3	Integrand ist Funktion von $x$ : . . . . .	122
5.11	Laplacetransformation . . . . .	123
5.12	numerische Integration . . . . .	123
<b>6</b>	<b>Differentialrechnung von Funktionen mehrerer Veränderlicher</b>	<b>127</b>
6.1	Graphische Darstellung . . . . .	127
6.2	Grenzwert und Stetigkeit . . . . .	128
6.3	Partielle Ableitung . . . . .	128
6.3.1	erste partielle Ableitung, Differenzierbarkeit . . . . .	128
6.3.2	höhere partielle Ableitungen, Satz von Schwarz . . . . .	129
6.4	Gradientenvektor . . . . .	131
6.5	Totales Differential . . . . .	132
6.6	Richtungsableitung . . . . .	133
6.7	Geometrische Deutungen . . . . .	134

6.8	Verallgemeinerte Kettenregel . . . . .	135
6.9	Implizites Ableiten . . . . .	136
6.10	Mehrdimensionale Taylorentwicklung . . . . .	139
6.11	Mehrdimensionale numerische Minimierung . . . . .	140
6.11.1	Methode des steilsten Abstiegs . . . . .	140
6.11.2	Richtungs-/Newton-Methoden . . . . .	142
6.12	Extremwerte ohne Nebenbedingungen . . . . .	143
6.13	Extremwerte mit Nebenbedingungen . . . . .	144

# 1 Grundbegriffe

## 1.1 Zahlen

### Natürliche Zahlen

$$\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\} \quad (1)$$

$$\mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\} = \{n \mid n \in \mathbb{N} \vee n \in \{0\}\} = \{0, 1, 2, 3, \dots\} \quad (2)$$

Arithmetische Grundoperationen auf dem Zahlenstrahl.

Die Menge  $\mathbb{N}$  ist abgeschlossen bezüglich der Addition und Multiplikation, nicht jedoch bezüglich der Subtraktion und Division:

$$a, b \in \mathbb{N}_0 \not\Rightarrow (a - b) \in \mathbb{N}_0 \quad (3)$$

$$a, b \in \mathbb{N}_0 \not\Rightarrow a/b \in \mathbb{N}_0 \quad (4)$$

Daher Einführung der ganzen Zahlen bzw. der rationalen Zahlen.

### Ganze Zahlen

$$\mathbb{Z} = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\} = \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\} \quad (5)$$

Die Menge  $\mathbb{Z}$  ist abgeschlossen bezüglich der Addition, Subtraktion und Multiplikation, nicht jedoch bezüglich der Division

$$a, b \in \mathbb{Z} \not\Rightarrow a/b \in \mathbb{Z} \quad (6)$$

Daher Einführung der rationalen Zahlen.

### Rationale Zahlen

$$\mathbb{Q} = \{q \mid q = m/n \wedge m \in \mathbb{Z} \wedge n \in \mathbb{Z} \setminus \{0\}\} \quad (7)$$

Die rationalen Zahlen liegen überall dicht auf der Zahlengeraden:

$$\text{Für } p, q \in \mathbb{Q} \text{ mit } p < q \text{ gibt es stets ein } r \in \mathbb{Q} \text{ mit } p < r < q \quad (8)$$

Trotzdem gibt es Punkte auf der Zahlengeraden, die *nicht* rationalen Zahlen entsprechen:

Die Menge  $\mathbb{Q}$  ist abgeschlossen bezüglich Addition, Subtraktion, Multiplikation und Division (außer Division durch Null), nicht jedoch beim Radizieren:

$$p \in \mathbb{Q}, n \in \mathbb{N} \not\Rightarrow \sqrt[n]{p} \in \mathbb{Q} \quad (9)$$

*Beispiele:*  $\sqrt{2}$ ,  $e$ ,  $\pi$ ,  $\ln 2$  sind keine rationalen Zahlen. *Beweis:* ♣

$\sqrt{-1}$  ist nicht erklärt.

Daher Einführung der reellen Zahlen bzw. der komplexen Zahlen.



## Reelle Zahlen

Jede reelle Zahl kann beliebig eng durch rationale Zahlen eingegrenzt werden:

$$p, q \in \mathbb{Q}, x \in \mathbb{R} : \quad p < x < q \quad \text{für} \quad (q - p) \rightarrow 0 \quad (10)$$

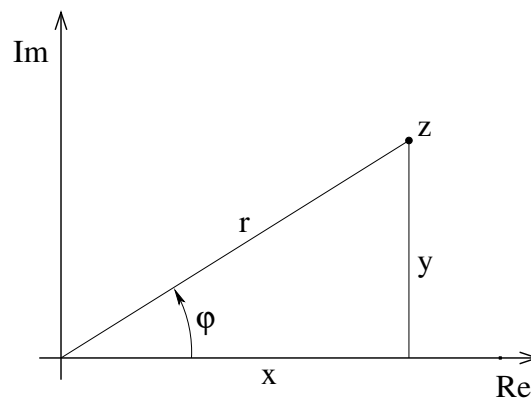
Dezimaldarstellung:

$$\text{reelle Zahlen} \begin{cases} \text{rationale Zahlen: abbrechend oder periodisch} \\ \text{irrationale Zahlen: weder abbrechend noch periodisch} \end{cases}$$

Es besteht eine umkehrbar eindeutige Zuordnung zwischen den Punkten der Zahlengeraden und den reellen Zahlen.

## Komplexe Zahlen

*Imaginäre Einheit i*: In Analogie zu den beiden Lösungen  $z_{1,2} = \pm 1 = \pm\sqrt{1}$  der Gleichung  $z^2 = 1$  definieren wir  $z_{1,2} = \pm i = \pm\sqrt{-1}$  als die beiden Lösungen der Gleichung  $z^2 = -1$ . Dabei ist  $i$  die Einheit auf der *imaginären Achse*, die senkrecht zum bisherigen, eindimensionalen Zahlenstrahl steht und diesen zur *Gaußschen Zahlenebene* erweitert:



In der Menge  $\mathbb{C}$  der komplexen Zahlen sind daher als Spezialfälle die Menge  $\mathbb{R}$  der reellen Zahlen ( $\text{Im}(z) = 0$ , reelle Achse) und die Menge  $\mathbb{I}$  der imaginären Zahlen ( $\text{Re}(z) = 0$ , imaginäre Achse) enthalten.

Eine komplexe Zahl  $z$  besteht dementsprechend aus zwei reellen Zahlen  $x$  und  $y$ , dem Real- bzw. Imaginärteil:

$$z = x + iy \quad , \quad x, y \in \mathbb{R} \quad (11)$$

$$x = \Re(z) = \text{Re}(z) \quad , \quad y = \Im(z) = \text{Im}(z) \quad (12)$$

Äquivalent zu dieser Darstellung in „kartesischen Koordinaten“ ist die alternative Darstellung in ebenen Polarkoordinaten, mit dem *Betrag*  $r = |z|$  und dem *Argument*  $\varphi = \arg(z)$ . Zwischen diesen Darstellungen gelten die üblichen Transformationsgleichungen:

$$x = r \cos \varphi \quad , \quad y = r \sin \varphi \quad (13)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad , \quad \varphi = \arctan\left(\frac{y}{x}\right) \quad (14)$$

Damit ist also  $z = x + iy = r(\cos \varphi + i \sin \varphi)$ . Nach dem Satz von Euler gilt:

$$e^{i\varphi} = \exp(i\varphi) = \cos \varphi + i \sin \varphi \quad (15)$$

sodaß eine komplexe Zahl auch als  $z = r \exp(i\varphi)$  notiert werden kann. Wir werden Gl. 15 in Abschnitt 4.7 aus der Taylorreihendefinition der komplexen Exponentialfunktion herleiten. Hier akzeptieren wir, daß der Ausdruck  $\exp(i\varphi)$  den Rechenregeln der reellen Exponentialfunktion folgt und daß wir  $i$  wie eine reelle Konstante behandeln können.

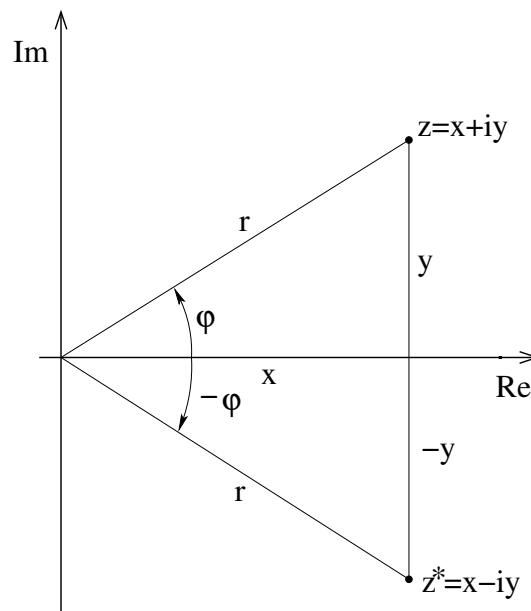
Zwei komplexe Zahlen sind gleich, wenn sie in Real- und Imaginärteil bzw. in Betrag und Argument übereinstimmen. Die Vergleichsoperationen  $>$ ,  $<$  sind für komplexe Zahlen *nicht* definiert.

*Definition:* Die zur komplexen Zahl  $z = x + iy$  konjugiert komplexe Zahl erhält man durch Ersetzen von  $i$  durch  $-i$ ; also gilt:

$$\operatorname{Re}(z) = \operatorname{Re}(z^*) \quad , \quad \operatorname{Im}(z) = -\operatorname{Im}(z^*) \quad (16)$$

$$|z| = |z^*| \quad , \quad \arg(z) = -\arg(z^*) \quad (17)$$

In der Gaußschen Zahlenebene entspricht die Bildung der konjugiert komplexen Zahl einer Spiegelung an der reellen Achse:



Also gilt offensichtlich:  $(z^*)^* = z$

## 1.2 Determinanten

Determinanten werden ausführlicher in MfC2 behandelt (Kapitel „Vektoren 3: lineare Algebra“). Hier werden Definition und Auswertung von Determinanten 2. und 3. Ordnung für das Vektorprodukt und das Spatprodukt benötigt (Abschnitt 2.3).

*Determinanten 2. Ordnung:*

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} \quad (18)$$

*Determinanten 3. Ordnung:*

*Achtung:* Die Sarrussche Regel (siehe Vorlesung ♣) funktioniert nur bei Determinanten 3. Ordnung! Der Entwicklungssatz von Laplace ist dagegen allgemein anwendbar auf Determinanten  $n$ -ter Ordnung (natürlich inkl.  $n = 2, 3$ ):

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum_k a_{mk} (-1)^{m+k} A_{mk} = \sum_j a_{jm} (-1)^{j+m} A_{jm} \quad (19)$$

Dabei kann, wie angedeutet, die Entwicklung entweder nach der  $m$ -ten Zeile (mit Summation über alle Spalten) oder nach der  $m$ -ten Spalte (mit Summation über alle Zeilen) erfolgen.  $A_{jk}$  steht hier für die Unterdeterminante, die man aus der eigentlichen Determinante durch Streichen der  $j$ -ten Zeile und der  $k$ -ten Spalte erhält.

Außer im (trivialen) Fall  $n = 2$  muß der Laplacesche Entwicklungssatz ggf. mehrfach hintereinander eingesetzt werden, um die einzelnen Unterdeterminanten  $A_{jk}$  auszuwerten. Trotzdem ist seine Verwendung zu empfehlen, da er nicht nur völlig allgemein ist, sondern mit etwas Geschick auch einfacher anzuwenden ist: z.B. empfiehlt sich immer eine Entwicklung nach einer Zeile oder Spalte mit vielen Nullen.

## 1.3 Rechentechniken

### 1.3.1 Rechnen mit Summen- und Produktzeichen

Beispiele Summenzeichen:

$$\sum_{i=1}^j i = 1 + 2 + \cdots + j \quad (20)$$

$$\sum_{k=m}^n a_k = a_m + a_{m+1} + \cdots + a_n \quad (\text{für } n > m) \quad (21)$$

Der *Laufindex*  $i$  bzw.  $k$  taucht dabei nur in der abgekürzten Schreibweise links auf, nicht in der ausgeschriebenen Summe rechts. Daher ist die Bezeichnung des Laufindex beliebig und ändert nichts am Wert der Summe:

$$\sum_{i=1}^j i = \sum_{n=1}^j n \quad (22)$$

Daher kann auch eine *Indextransformation* durchgeführt werden, also eine Umrechnung einer Indexvariablen in eine andere, unter Verwendung einer Transformationsbeziehung, wiederum ohne daß sich der Wert der Summe ändert. Triviales (und nutzloses) Beispiel:

$$\sum_{i=1}^n i = \sum_{j=3}^{n+2} (j-2), \quad \text{mit } j = i + 2 \quad (23)$$

Dies kann zur Vereinfachung von Ausdrücken und zur einfacheren Summenberechnung verwendet werden. Dabei ist allerdings zu beachten, daß das Summenzeichen impliziert, daß sich der Laufindex (z.B.  $i$ ) von einem Summenterm zum nächsten um genau 1 erhöht,

die Summe also sozusagen auch ein  $\Delta i$  enthält (was aber in der Notation nicht explizit erscheint; vergleiche Substitution der Integrationsvariablen in Kapitel 5.4, wobei  $x$  und  $dx$  transformiert werden müssen; daher ist es hilfreich, daß  $dx$  in der Integralnotation explizit notiert wird). Bei additiven Indextransformationen ist das belanglos, kann aber bei multiplikativen Indextransformationen zu Fehlern führen.

Konstante Faktoren (die also den Laufindex nicht enthalten) können aus einer Summe ausgeklammert werden, z.B.:

$$\sum_{k=1}^n 3(nk + n) = 3n \sum_{k=1}^n (k + 1) \quad (24)$$

*Summen und Produkte von Summenausdrücken:* Bei gleicher Unter- und Obergrenze können Summen in Additionen direkt zusammengefaßt werden:

$$\left( \sum_{i=1}^n a_i \right) + \left( \sum_{i=1}^n b_i \right) = \sum_{i=1}^n (a_i + b_i) \quad (25)$$

Umgekehrt gelesen kann also eine Summe über ein additives Argument in zwei Teilsummen zerlegt werden. Bei einer Doppelsumme eines additiven Arguments ist zwar die Reihenfolge der Ausführung der Summationszeichen irrelevant, aber eine weitere Zerlegung (bzw. umgekehrt gelesen eine Zusammenführung der Teilsummen) ist so einfach nicht möglich:

$$\sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m (a_i + b_j) \right) = \sum_{j=1}^m \left( \sum_{i=1}^n (a_i + b_j) \right) \neq \sum_{i=1}^n a_i + \sum_{j=1}^m b_j \quad (26)$$

Bei Multiplikationen kann eine analoge Zerlegung bzw. Zusammenführung gemacht werden:

$$\left( \sum_{i=1}^n a_i \right) \cdot \left( \sum_{j=1}^m b_j \right) = \sum_{i=1}^n \left( \sum_{j=1}^m a_i b_j \right) = \sum_{j=1}^m \left( \sum_{i=1}^n a_i b_j \right) =: \sum_{i,j} a_i b_j \quad (27)$$

In diesem Fall ist allerdings strikt darauf zu achten, in den beiden Summen unterschiedliche Indices zu verwenden:

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i b_j \neq \sum_{i=1}^n \sum_{i=1}^n a_i b_j \neq \sum_{i=1}^n a_i b_i \quad (28)$$

Das *Produktzeichen* ist analog dem Summenzeichen definiert:

$$\prod_{i=1}^3 a_i = a_1 \cdot a_2 \cdot a_3 \quad (29)$$

### 1.3.2 Rechnen mit Absolutbeträgen

*Definition:*

$$|a| = \begin{cases} a & \text{für } a \geq 0 \\ -a & \text{für } a < 0 \end{cases} \quad (30)$$

Es gilt für  $a, b \in \mathbb{R}$ :

$$|a| \geq 0 \quad (31)$$

$$|a| = |-a| \quad (32)$$

$$|a \cdot b| = |a| \cdot |b| \quad (33)$$

Dreiecksungleichung:  $|a + b| \leq |a| + |b|$ ; Beweis: ♣

### 1.3.3 Rechnen mit Ungleichungen

Transitivität:

$$a < b \wedge b < c \Rightarrow a < c \quad (34)$$

Rechenregeln: Aus  $a < b$  folgt

$$a + c < b + c \quad \text{für } c \in \mathbb{R} \quad (35)$$

$$a \cdot c < b \cdot c \quad \text{für } c > 0 \quad (36)$$

$$a \cdot c > b \cdot c \quad \text{für } c < 0 \quad (37)$$

$$a \cdot c = b \cdot c = 0 \quad \text{für } c = 0 \quad (38)$$

$$\frac{1}{a} > \frac{1}{b} \quad \text{für } ab > 0 \quad (39)$$

$$\frac{1}{a} < \frac{1}{b} \quad \text{für } ab < 0 \quad (40)$$

$$\text{nicht definiert} \quad \text{für } ab = 0 \quad (41)$$

### 1.3.4 Rechnen mit komplexen Zahlen

Es sei

$$z_1 = x_1 + iy_1 = r_1(\cos \varphi_1 + i \sin \varphi_1) \quad (42)$$

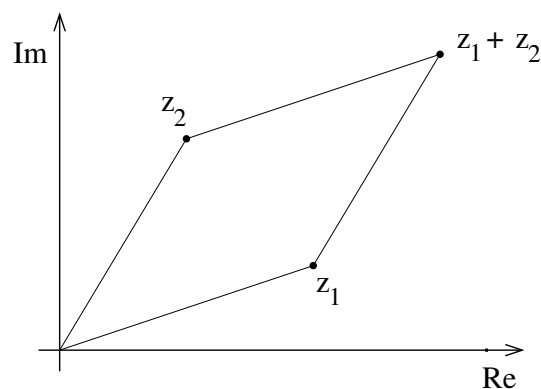
$$z_2 = x_2 + iy_2 = r_2(\cos \varphi_2 + i \sin \varphi_2) \quad (43)$$

#### Addition/Subtraktion

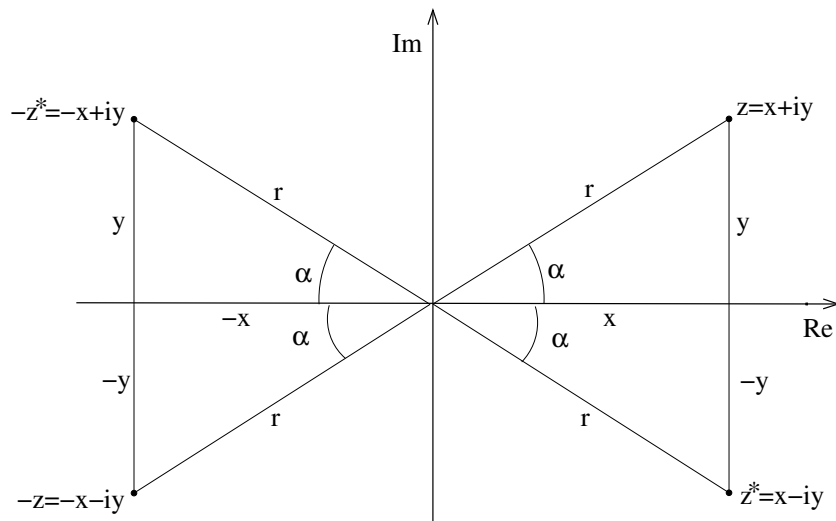
Real- und Imaginärteile werden getrennt addiert/subtrahiert:

$$z_1 \pm z_2 = (x_1 \pm x_2) + i(y_1 \pm y_2) \quad (44)$$

Dies entspricht der Addition/Subtraktion von Vektoren (siehe Kapitel 2.3):



Die Bildung des Negativen von  $z$  entspricht einer Punktspiegelung am Ursprung:



## Multiplikation

$$z_1 \cdot z_2 = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + i(x_1 y_2 + y_1 x_2) \quad (45)$$

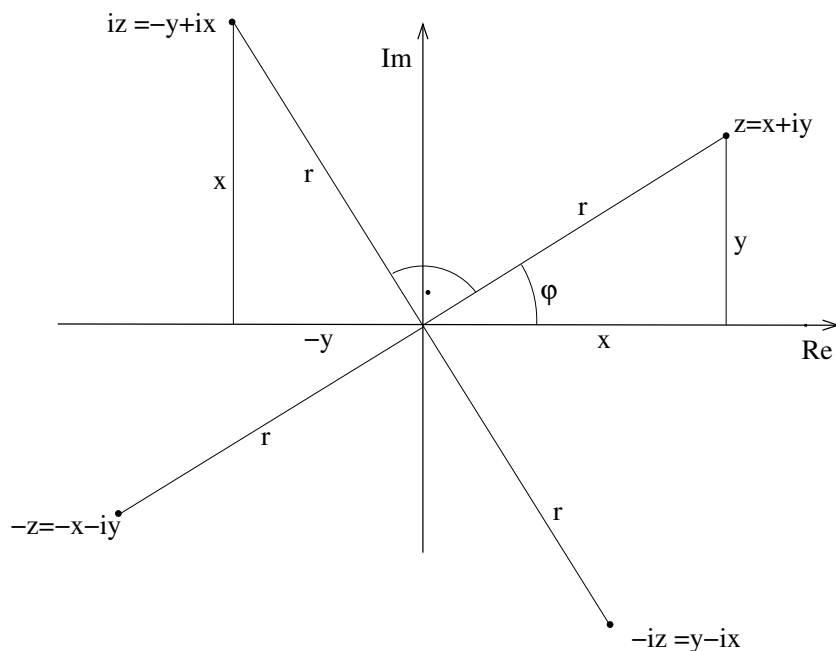
bzw. in Polarkoordinaten:

$$z_1 \cdot z_2 = r_1 r_2 (\cos[\varphi_1 + \varphi_2] + i \sin[\varphi_1 + \varphi_2]) \quad (46)$$

d.h. die Beträge werden multipliziert, die Argumente addiert. Zur Herleitung von Gl. 46 in dieser Form braucht man Winkeladditionstheoreme. Erheblich leichter ist die Herleitung in Exponentialschreibweise:

$$z_1 \cdot z_2 = (r_1 e^{i\varphi_1}) \cdot (r_2 e^{i\varphi_2}) = r_1 r_2 e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)} \quad (47)$$

Aus dieser Eigenschaft (Multiplikation der Beträge, Addition der Argumente) wird klar, daß eine Multiplikation mit einer komplexen Zahl  $z = \exp(i\varphi)$  vom Betrag  $r = 1$  einer Rotation um den Winkel  $\varphi$  in der Gaußschen Zahlenebene entspricht. *Spezialfälle:* Multiplikationen mit 1,  $i$ ,  $-1$ ,  $-i$  entsprechen Drehungen um  $0^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $180^\circ$ ,  $270^\circ$ :



*Beachte:* Obwohl die Addition/Subtraktion komplexer Zahlen der Addition/Subtraktion von Vektoren entspricht, entspricht das Produkt komplexer Zahlen *keinem* der üblichen Vektorprodukte!

## Division

Rückführung auf Multiplikation durch Erzeugung eines reellen Nenners:

$$\frac{z_1}{z_2} = \frac{z_1 z_2^*}{z_2 z_2^*} = \frac{r_1}{r_2} (\cos[\varphi_1 - \varphi_2] + i \sin[\varphi_1 - \varphi_2]) \quad (48)$$

d.h. die Beträge werden dividiert, die Argumente subtrahiert.

Spezialfall:

$$\frac{1}{i} = -i \quad (49)$$

## Rechnen mit konjugiert komplexen Zahlen

$$(z_1 \pm z_2)^* = z_1^* \pm z_2^* \quad (50)$$

$$(z_1 \cdot z_2)^* = z_1^* \cdot z_2^* \quad (51)$$

$$\left(\frac{z_1}{z_2}\right)^* = \frac{z_1^*}{z_2^*} \quad (52)$$

$$z + z^* = 2 \operatorname{Re}(z) \quad , \quad z - z^* = 2i \operatorname{Im}(z) \quad (53)$$

$$z \cdot z^* = |z|^2 \quad (54)$$

## Potenzieren

Die sog. Formel von Moivre ergibt sich direkt in der Exponentialnotation:

$$z^n = (r \cdot e^{i\varphi})^n = r^n \cdot e^{in\varphi} = r^n (\cos n\varphi + i \sin n\varphi) \quad (55)$$

Damit können die Zahlen 1,  $i$ ,  $-1$  und  $-i$  auch „aufwendiger notiert“ werden (mit  $k \in \mathbb{Z}$ ):

$$e^{i(0+2k\pi)} = +1 \quad (56)$$

$$e^{i(\frac{\pi}{2}+2k\pi)} = +i \quad (57)$$

$$e^{i(\pi+2k\pi)} = -1 \quad (58)$$

$$e^{i(\frac{3\pi}{2}+2k\pi)} = -i \quad (59)$$

Diese Beziehungen werden bei den Fourierreihen wichtig (Mathematik für Chemiker II).

## Radizieren

Die komplexe Zahl  $z_2 = \sqrt[n]{z_1}$  ist Lösung der Gleichung

$$z_2^n = z_1 \quad (60)$$

Zur Bestimmung von  $z_2$  verwenden wir wieder die Exponentialschreibweise:

$$z_1 = r_1 e^{i\varphi_1} = r_1 e^{i(\varphi_1 + 2k\pi)} \quad \text{mit } k \in \mathbb{Z} \quad (61)$$

$$z_2 = r_2 e^{i\varphi_2} \quad (62)$$

Die Berücksichtigung der  $2\pi$ -Periodizität des Arguments ist dabei wichtig, um tatsächlich alle Lösungen zu erhalten. Aus Gl. 60 wird damit:

$$r_2^n e^{in\varphi_2} = r_1 e^{i(\varphi_1 + 2k\pi)} \quad (63)$$

Da für die Gleichheit komplexer Zahlen jeweils Beträge und Argumente für sich gleich sein müssen, ergibt sich also:

$$r_2 = \sqrt[n]{r_1} \quad (64)$$

$$\varphi_2 = \frac{\varphi_1 + 2k\pi}{n} = \frac{\varphi_1}{n} + \frac{k}{n} 2\pi \quad (65)$$

Für  $k = 0, 1, \dots, n-1$  sind dies  $n$  unterschiedliche Werte für  $\varphi_2$ . (In Abschnitt 3.1.3 wird klar werden, warum wir tatsächlich  $n$  Lösungen erwarten und erhalten müssen.) Offenbar ist die Betragsdifferenz (der Winkel) zwischen zwei sukzessiven Lösungen in der Gaußschen Zahlenebene immer gleich, nämlich  $2\pi/n$ , weshalb die  $n$  Lösungen einen Kreis um den Ursprung dieser Ebene in  $n$  gleiche Teile teilen. (In Abschnitt 3.1.3 wird außerdem klar werden, daß die Gesamtheit der Lösungen genau dann spiegelsymmetrisch zur reellen Achse sein muß, wenn  $z_1$  rein reell ist; bei rein imaginärem oder komplexem  $z_1$  muß das nicht der Fall sein.)

Als Beispiel betrachten wir  $\sqrt[3]{8}$  bzw.  $z^3 = 8$ . Nach dem Ansatz Gln. 61,62 gilt also

$$r^3 e^{i3\varphi} = 8 e^{i\pi(0+2k)} \quad (66)$$

und es ergibt sich

$$r = \sqrt[3]{8} \quad (67)$$

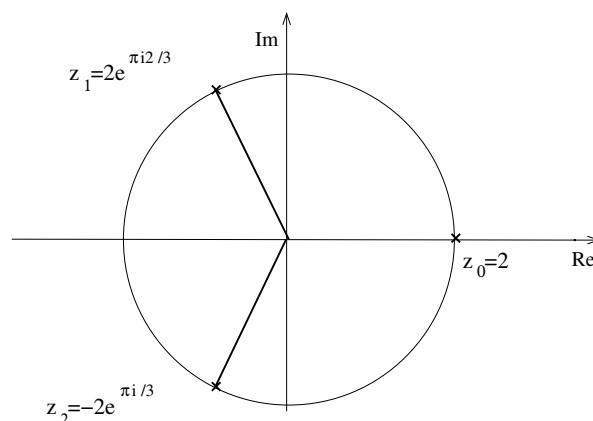
$$\varphi = \frac{2k}{3}\pi \quad \text{für } k = 0, 1, 2 \quad (68)$$

Einsetzen in  $z = r e^{i\varphi}$  liefert die drei Lösungen:

$$z_0 = 2e^0 = 2 \quad (69)$$

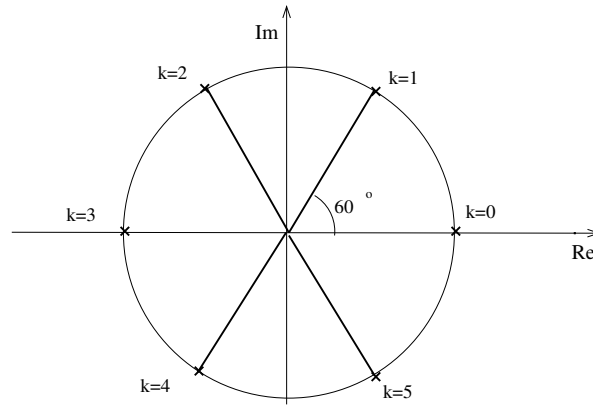
$$z_1 = 2e^{2i\pi/3} \quad (70)$$

$$z_2 = 2e^{4i\pi/3} = -2e^{i\pi/3} = 2e^{-2i\pi/3} \quad (71)$$





*Spezialfall:  $n$ -te Einheitswurzeln:* Hier ist  $z_1 = 1$  und damit auch  $r_1 = r_2 = 1$ , d.h. alle Lösungen liegen auf einem Einheitskreis um den Ursprung. Zudem ist  $\varphi_1 = 0$  und damit  $\varphi_2 = 2k\pi/n$ ; insbesondere liegt *eine* dieser Lösungen ( $k=0$ ) also immer auf der reellen Achse, bei  $z = 1$ , und die übrigen Lösungen teilen den Kreis in gleiche Teile. In der komplexen Zahlenebene sind die  $n$ -ten Einheitswurzeln also sehr einfach graphisch konstruierbar, wie hier für die sechs 6-ten Einheitswurzeln gezeigt:



## 1.4 Beweistechniken

Beispiel für *vollständige Induktion*:

Bernoullische Ungleichung:

$$(1+a)^n > 1+na \quad \text{für } \{a \in \mathbb{R} | a > -1 \wedge a \neq 0\}, n \in \mathbb{N}/\{1\} \quad (72)$$

*Induktionsanfang*: Zeige, daß die Behauptung für einen speziellen (frei gewählten) Wert von  $n$  gilt; hier z.B. für  $n = 2$ :

$$(1+a)^2 = a^2 + 2a + 1 > 2a + 1 \quad (73)$$

Also gilt die Behauptung für  $n = 2$ .

*Induktionsannahme*: Die Behauptung gelte für irgendein beliebiges, nicht näher spezifiziertes  $n$ . Dies ist zunächst eine Annahme; hier wird nichts gezeigt.

*Induktionsschluß*: Zeige unter Voraussetzung der Induktionsannahme, daß die Behauptung dann auch für  $n+1$  gilt. Hier ist also zu zeigen, daß

$$(1+a)^{n+1} > 1+(n+1)a \quad (74)$$

gilt, unter der Voraussetzung

$$(1+a)^n > 1+na \quad (75)$$

Dies kann wie folgt durchgeführt werden:

$$(1+a)^{n+1} = (1+a)^n(a+1) \stackrel{\text{Gl. 75}}{>} (1+na)(1+a) = 1+(n+1)a+na^2 > 1+(n+1)a \quad (76)$$

was zu zeigen war.

Da die Behauptung für  $n = 2$  explizit bewiesen wurde, gilt sie mithin auch für  $n = 3$ . Da sie für  $n = 3$  gilt, gilt sie aber auch für  $n = 4$ , usw. Daher ist sie hiermit für alle  $n \in \mathbb{N}/\{1\}$  gezeigt, wie gefordert.

## 1.5 Kombinatorik

Definition Fakultät:

$$n! = \begin{cases} \prod_{i=1}^n i & \text{für } n \geq 1 \\ 1 & \text{für } n = 0 \end{cases} \quad (77)$$

Definition Binomialkoeffizient:

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!} \quad (78)$$

binomischer Lehrsatz:

$$(a+b)^n = \binom{n}{0}a^n + \binom{n}{1}a^{n-1}b + \binom{n}{2}a^{n-2}b^2 + \dots + \binom{n}{n-1}ab^{n-1} + \binom{n}{n}b^n \quad (79)$$

$$= \sum_{i=0}^n \binom{n}{i} a^{n-i} b^i \quad (80)$$

Die Binomialkoeffizienten ergeben sich dabei aus dem *Pascalschen Dreieck*: ♣

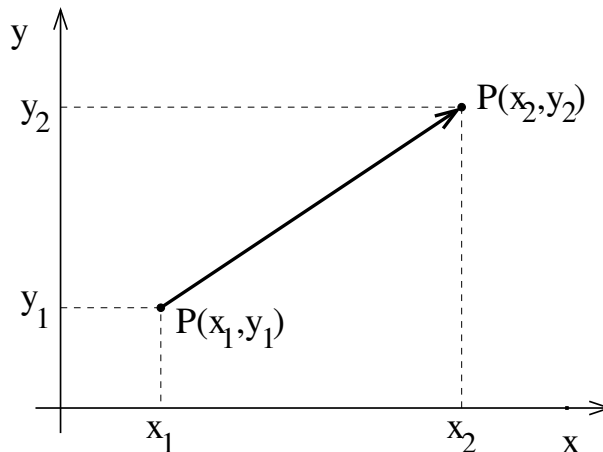
Permutation, Variation, Kombination: siehe Lehrbücher ♣

## 2 Vektoren I: Grundlagen

### 2.1 Der Vektorbegriff

Skalare  $\leftrightarrow$  Vektoren: ♣

Ein Vektor  $\vec{r}$  kann veranschaulicht werden als gerichtete Strecke  $\vec{r} = \overrightarrow{P_1 P_2}$  im  $n$ -dimensionalen Raum, vom Anfangspunkt  $P_1$  zum Endpunkt  $P_2$ :



Der Vektor  $\vec{r} = \overrightarrow{P_1 P_2}$  kann numerisch durch  $n$  kartesische Komponenten dargestellt werden, die der Differenz der kartesischen Koordinaten von End- und Anfangspunkt entsprechen:

$$\overrightarrow{P_1 P_2} = \begin{pmatrix} x_2 - x_1 \\ y_2 - y_1 \\ z_2 - z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \\ \Delta z \end{pmatrix} \quad (81)$$

Wir betrachten in der Regel die Spezialfälle  $n = 2$  oder  $n = 3$ .

Alternative Darstellung: Länge und Richtungskosinus: ♣

Die Länge eines Vektors ist gegeben durch:

$$r = |\vec{r}| = \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2} \quad (82)$$

freie  $\leftrightarrow$  gebundene Vektoren: ♣

*Ortsvektoren* beginnen im Ursprung des Koordinatensystems  $P_1 = O(0|0|0)$  und enden im zu charakterisierenden Punkt im Raum  $P_2 = P(x|y|z)$ . Die Komponenten des Ortsvektors entsprechen den kartesischen Koordinaten von  $P_2$ :

$$\overrightarrow{OP} = \vec{r}_P = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (83)$$

Jedem Punkt des Raums entspricht ein Ortsvektor. Daher läßt sich jede Beziehung zwischen Raumpunkten durch eine Vektorgleichung formulieren. Dies wird in Abschnitt 2.4 intensiv ausgenutzt.

Der *Nullvektor* ist formal der Ortsvektor des Ursprungs:

$$\vec{r}_O = \vec{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (84)$$

*Einheitsvektoren*  $\vec{e}$  sind Vektoren der Länge 1. Es gilt  $|\vec{e}| = 1$ . Den Einheitsvektor in Richtung des Vektors  $\vec{r}$  notieren wir als  $\hat{r}$ .

Die Einheitsvektoren entlang der kartesischen Koordinatenachsen bezeichnen wir mit:

$$\hat{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{j} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{k} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (85)$$

Sie bilden eine vollständige, orthonormale Basis für den 3-dimensionalen Raum (siehe MfC2: Kapitel „Vektoren 2: Vektorräume“) und können daher für eine weitere, alternative Notation verwendet werden:

$$\vec{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = x \cdot \hat{i} + y \cdot \hat{j} + z \cdot \hat{k} \quad (86)$$

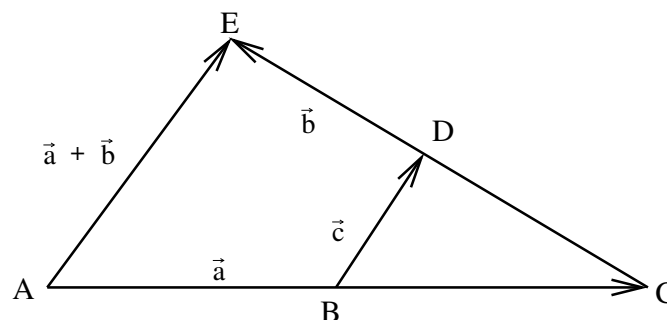
*Flächenvektoren* stehen senkrecht auf einer Fläche und haben eine Länge, die dem Flächeninhalt dieser Fläche entspricht. Hierbei ergeben sich zwei formale Probleme: (1) Streng genommen haben Strecken und Flächen unterschiedliche Maßeinheiten, also sollte man besser sagen, daß die Länge eines Flächenvektors mit dem Flächeninhalt der Fläche skaliert (also nur relativ zu anderen Flächenvektoren gesehen mit einem Flächeninhalt zusammenhängt). (2) Durch die Angabe „senkrecht zu einer Fläche“ ist (in 3D) nur eine Gerade angegeben, auf der der Flächenvektor liegen muß. Das Vorzeichen des Flächenvektors muß durch zusätzliche Angaben eindeutig festgelegt werden.

axiale Vektoren (Pseudovektoren): ♣

## 2.2 Rechnen mit Vektoren, Teil 1

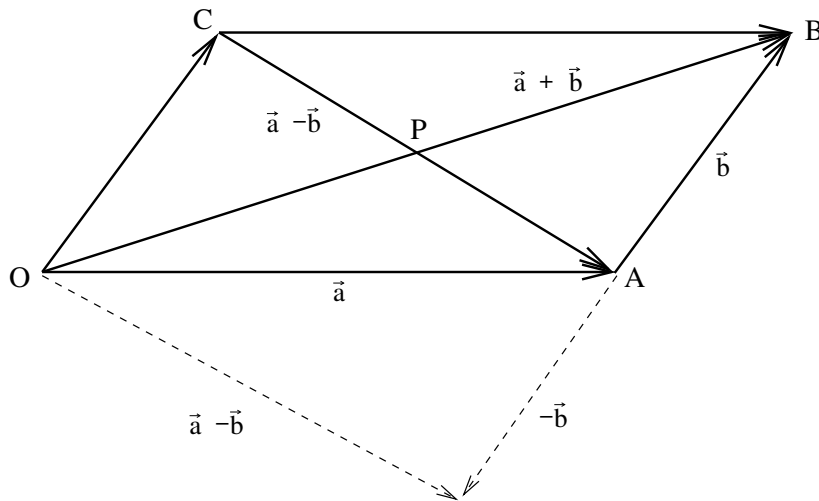
Bereits ohne Rückgriff auf die (kartesische) Komponentendarstellung lassen sich Addition und Subtraktion von Vektoren sowie Multiplikation mit einem Skalar als rein „graphische“ bzw. geometrische Operationen verstehen (mit freien/abstrakten Vektoren). Daraus ergibt sich z.B. anschaulich das Kommutativgesetz der Vektoraddition (s. Abbildung auf S. 15). In vielen Fällen lassen sich so auch auf einfachste Weise geometrische Sätze beweisen:

Zum Beispiel ist im folgenden Bild



der Vektor  $\vec{c}$  offenbar gegeben durch  $\vec{c} = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b}$  (vom Punkt B über Punkt C zu Punkt D). Diese Beziehung läßt sich rein rechnerisch umstellen zu  $\vec{c} = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ . Also ergibt sich, daß der Vektor  $(\vec{a} + \vec{b})$  parallel zum Vektor  $\vec{c}$  ist und doppelt so lang ist. Da dabei keinerlei Annahmen über die Lage der Punkte A bis E eingingen, wurde soeben folgender Satz bewiesen: Die Strecke, die zwei Seitenmittelpunkte eines beliebigen Dreiecks verbindet, ist parallel zur dritten Seite und halb so lang wie diese.

Ähnlich einfach läßt sich der Satz beweisen, daß sich die Diagonalen eines Parallelogramms gegenseitig halbieren. Dazu betrachten wir diese Zeichnung:



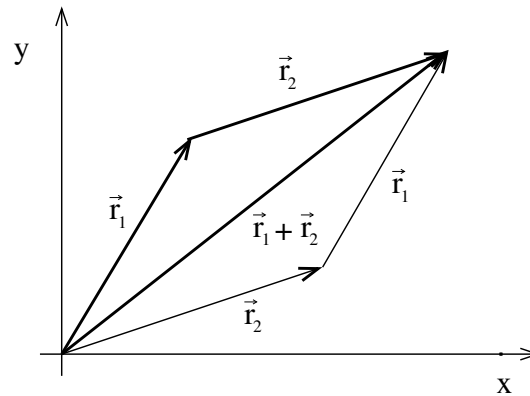
Es sei  $P_1$  der Mittelpunkt der einen Diagonalen  $\vec{a} + \vec{b}$  und  $P_2$  der Mittelpunkt der anderen Diagonalen  $\vec{a} - \vec{b}$ . Zu zeigen ist, daß  $P_1 = P_2$  gilt (in der Zeichnung abgekürzt durch P). Die Strategie ist, auf zwei verschiedenen Wegen vom Ursprung O zu  $P_1$  bzw.  $P_2$  zu gehen und daraus die gewünschte Identität zu erzeugen. Offenbar gilt auf der einen Diagonalen  $\overrightarrow{OP_1} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ . Ganz analog ist  $\overrightarrow{CP_2} = \frac{1}{2}(\vec{a} - \vec{b})$  auf der anderen Diagonalen. Letzteres können wir ergänzen zu  $\overrightarrow{OP_2} = \overrightarrow{OC} + \overrightarrow{CP_2}$ , was nichts anderes ist als  $\overrightarrow{OC} + \overrightarrow{CP_2} = \vec{b} + \frac{1}{2}(\vec{a} - \vec{b}) = \frac{1}{2}\vec{a} + \frac{1}{2}\vec{b} = \frac{1}{2}(\vec{a} + \vec{b})$ . Damit ist wie gewünscht gezeigt  $P_1 = P_2 = P$ .

## 2.3 Rechnen mit Vektoren, Teil 2

### 2.3.1 Addition

Zwei Vektoren werden addiert, indem man ihre kartesischen Komponenten addiert:

$$\vec{r}_1 + \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \\ z_1 + z_2 \end{pmatrix} \quad (87)$$



Es gelten Kommutativ- und Assoziativgesetz:

$$\vec{r}_1 + \vec{r}_2 = \vec{r}_2 + \vec{r}_1 \quad , \quad (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) + \vec{r}_3 = \vec{r}_1 + (\vec{r}_2 + \vec{r}_3) \quad (88)$$

### 2.3.2 Multiplikation mit einem Skalar

$$\lambda \vec{r} = \begin{pmatrix} \lambda x \\ \lambda y \\ \lambda z \end{pmatrix} \quad (89)$$

Dabei bedeutet der Übergang von  $\vec{r}$  zu  $\lambda \vec{r}$ , daß der Betrag (die Länge) des Vektors  $\vec{r}$  um den Faktor  $|\lambda|$  verändert wird (Streckung oder Stauchung). Die Vektoren  $\vec{r}$  und  $\lambda \vec{r}$  sind je nach Vorzeichen von  $\lambda$  parallel oder antiparallel.

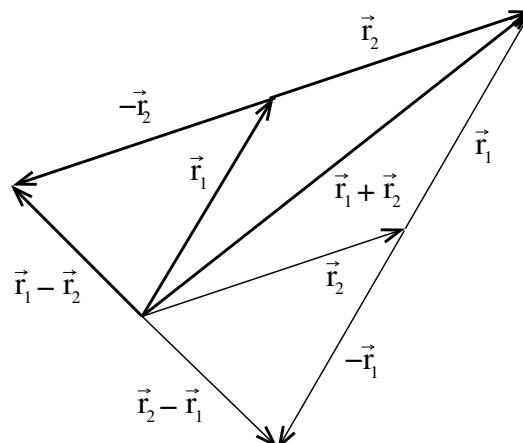
Es gelten folgende Distributivgesetze:

$$\lambda(\vec{r}_1 + \vec{r}_2) = \lambda \vec{r}_1 + \lambda \vec{r}_2 \quad , \quad (\lambda + \mu)\vec{r} = \lambda \vec{r} + \mu \vec{r} \quad (90)$$

### 2.3.3 Subtraktion

Die Subtraktion  $\vec{r}_1 - \vec{r}_2$  kann formal interpretiert werden als Addition  $\vec{r}_1 + \lambda \vec{r}_2$  mit  $\lambda = -1$ , also folgt:

$$\vec{r}_1 - \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_1 - x_2 \\ y_1 - y_2 \\ z_1 - z_2 \end{pmatrix} \quad (91)$$

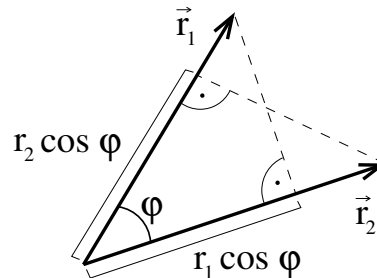


### 2.3.4 Skalarprodukt

Definition:

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = |\vec{r}_1| |\vec{r}_2| \cos \varphi \quad (92)$$

Das Skalarprodukt heißt auch „inneres Produkt“; alternative Notation:  $(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ .



*Wichtig:* Das Resultat ist kein Vektor, sondern ein *Skalar*! Außerdem beinhaltet die Definition eine Projektion, die nicht eindeutig invertiert werden kann; daher existiert keine „Skalardivision“.

Es gilt das Kommutativ- und das Distributivgesetz:

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \vec{r}_2 \cdot \vec{r}_1 \quad , \quad \vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 + \vec{r}_3) = \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 + \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_3 \quad (93)$$

Ein Assoziativgesetz kann noch nicht einmal hingeschrieben werden.

Wichtige Spezialfälle (mit der Notation  $\hat{r} = \vec{r}/|\vec{r}|$  für Einheitsvektoren):

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_1 = |\vec{r}_1|^2 = |\vec{r}_1|^2 \quad (94)$$

$$\vec{r}_1 \cdot \hat{r}_2 = \text{Projektion von } |\vec{r}_1| \text{ auf Richtung von } \vec{r}_2 \quad (95)$$

$$(\vec{r}_1 \cdot \hat{r}_2) \hat{r}_2 = \text{Projektion von } \vec{r}_1 \text{ als Vektor auf Richtung von } \vec{r}_2 \quad (96)$$

$$\hat{r}_1 \cdot \hat{r}_2 = \cos \varphi \quad (97)$$

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = 0 \quad \text{für } \vec{r}_1 \perp \vec{r}_2 \quad (98)$$

Insbesondere gilt damit für die kartesischen Einheitsvektoren:

$$\hat{i} \cdot \hat{i} = \hat{j} \cdot \hat{j} = \hat{k} \cdot \hat{k} = 1 \quad (99)$$

$$\hat{i} \cdot \hat{j} = \hat{j} \cdot \hat{k} = \hat{k} \cdot \hat{i} = 0 \quad (100)$$

Aus der alternativen Vektornotation Gl. 86 ergibt sich mit Hilfe des Distributivgesetzes und der Gln. 99 und 100 sofort die Darstellung des Skalarprodukts in kartesischen Komponenten:

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = (x_1 \hat{i} + y_1 \hat{j} + z_1 \hat{k}) \cdot (x_2 \hat{i} + y_2 \hat{j} + z_2 \hat{k}) \quad (101)$$

$$= x_1 x_2 \underbrace{(\hat{i} \cdot \hat{i})}_1 + x_1 y_2 \underbrace{(\hat{i} \cdot \hat{j})}_0 + x_1 z_2 \underbrace{(\hat{i} \cdot \hat{k})}_0 \quad (102)$$

$$+ y_1 x_2 \underbrace{(\hat{j} \cdot \hat{i})}_0 + y_1 y_2 \underbrace{(\hat{j} \cdot \hat{j})}_1 + y_1 z_2 \underbrace{(\hat{j} \cdot \hat{k})}_0 \\ + z_1 x_2 \underbrace{(\hat{k} \cdot \hat{i})}_0 + z_1 y_2 \underbrace{(\hat{k} \cdot \hat{j})}_0 + z_1 z_2 \underbrace{(\hat{k} \cdot \hat{k})}_1 \quad (103)$$

$$= x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2 \quad (104)$$

mit dem Spezialfall

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_1 = |\vec{r}_1|^2 = x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 \quad (105)$$

### 2.3.5 Vektorprodukt

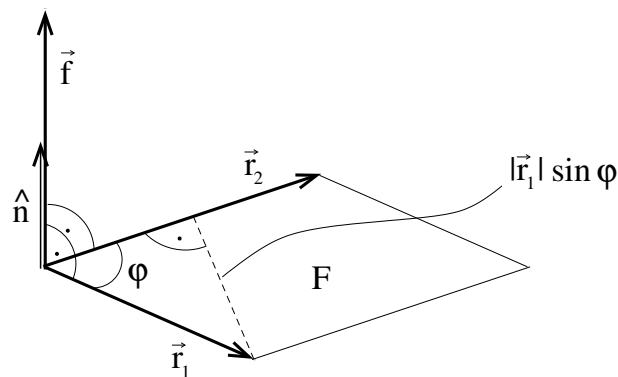
Definition:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = F \hat{n} = \vec{f} \quad (106)$$

$$\text{mit } F = |\vec{r}_1| |\vec{r}_2| \sin \varphi \quad (107)$$

$$\text{sowie } |\hat{n}| = 1 \quad \text{und} \quad \hat{n} \perp \vec{r}_1 \wedge \hat{n} \perp \vec{r}_2 \quad (108)$$

$\vec{f}$  ist der Flächenvektor des von  $\vec{r}_1$  und  $\vec{r}_2$  aufgespannten Parallelogramms vom Flächeninhalt  $F$  (also ergibt sich dieser Flächeninhalt als Betrag des Vektorprodukts:  $F = |\vec{r}_1 \times \vec{r}_2|$ ). Wegen der auf S. 13 beschriebenen Zweideutigkeit der Richtung von Flächenvektoren gehört zur eindeutigen Definition des Vektorprodukts  $\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \vec{f}$  auch noch die (willkürliche) Festlegung, daß die Vektoren  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{f}$  in *dieser* Reihenfolge ein *Rechtssystem* bilden. Das Vektorprodukt heißt auch „äußeres Produkt“.



Da sich der Flächeninhalt  $F$  bei Scherung des Parallelogramms (dies entspricht anderen Werten von  $\varphi$ ) verändert, dies jedoch durch Längenänderung von  $\vec{r}_1$  bzw.  $\vec{r}_2$  leicht kompensiert werden kann, ist die inverse Operation auch hier nicht eindeutig, weshalb es keine „Vektordivision“ gibt.

Im Gegensatz zum Skalarprodukt ist das Vektorprodukt *nicht* kommutativ sondern antikommutativ:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = -(\vec{r}_2 \times \vec{r}_1) = -\vec{r}_2 \times \vec{r}_1 \quad (109)$$

Allerdings gilt wieder das Distributivgesetz in gleicher Weise:

$$\vec{r}_1 \times (\vec{r}_2 + \vec{r}_3) = \vec{r}_1 \times \vec{r}_2 + \vec{r}_1 \times \vec{r}_3 \quad (110)$$

Obwohl hier ein Assoziativgesetz zumindest sinnvoll hingeschrieben werden kann, gilt es trotzdem nicht, sondern mit dem sog. Entwicklungssatz (englisch: triple vector product; nicht zu verwechseln mit dem Spatprodukt!) kann man zeigen:

$$\vec{r}_1 \times (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) = \vec{r}_2(\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_3) - \vec{r}_3(\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2) \neq \vec{r}_2(\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_3) - \vec{r}_1(\vec{r}_2 \cdot \vec{r}_3) = (\vec{r}_1 \times \vec{r}_2) \times \vec{r}_3 \quad (111)$$



Wichtige Spezialfälle:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \vec{0} \quad \text{für } \varphi = 0 \quad (112)$$

$$\text{insbes.: } \vec{r}_1 \times \vec{r}_1 = \vec{0} \quad (113)$$

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = |\vec{r}_1||\vec{r}_2|\hat{n} \quad \text{für } \varphi = 90^\circ \quad (114)$$

$$\text{insbes.: } \hat{r}_1 \times \hat{r}_2 = \hat{n} \quad \text{für } \varphi = 90^\circ \quad (115)$$

Insbesondere gilt mit Gl. 115 und unter Verwendung von Gl. 109 für die kartesischen Einheitsvektoren:

$$\hat{i} \times \hat{j} = \hat{k} \Rightarrow \hat{j} \times \hat{i} = -\hat{k} \quad (116)$$

$$\hat{j} \times \hat{k} = \hat{i} \Rightarrow \hat{k} \times \hat{j} = -\hat{i} \quad (117)$$

$$\hat{k} \times \hat{i} = \hat{j} \Rightarrow \hat{i} \times \hat{k} = -\hat{j} \quad (118)$$

Wie schon beim Skalarprodukt ergibt sich auch hier aus der alternativen Vektornotation Gl. 86 mit Hilfe des Distributivgesetzes und der Gln. 116–118 mit elementaren (hier aber etwas schreibaufwendigen) Umformungsschritten die Darstellung des Vektorprodukts in kartesischen Komponenten:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = (x_1\hat{i} + y_1\hat{j} + z_1\hat{k}) \times (x_2\hat{i} + y_2\hat{j} + z_2\hat{k}) \quad (119)$$

$$\begin{aligned} &= x_1x_2(\underbrace{\hat{i} \times \hat{i}}_{\vec{0}}) + x_1y_2(\underbrace{\hat{i} \times \hat{j}}_{\hat{k}}) + x_1z_2(\underbrace{\hat{i} \times \hat{k}}_{-\hat{j}}) \\ &\quad + y_1x_2(\underbrace{\hat{j} \times \hat{i}}_{-\hat{k}}) + y_1y_2(\underbrace{\hat{j} \times \hat{j}}_{\vec{0}}) + y_1z_2(\underbrace{\hat{j} \times \hat{k}}_{\hat{i}}) \\ &\quad + z_1x_2(\underbrace{\hat{k} \times \hat{i}}_{\hat{j}}) + z_1y_2(\underbrace{\hat{k} \times \hat{j}}_{-\hat{i}}) + z_1z_2(\underbrace{\hat{k} \times \hat{k}}_{\vec{0}}) \end{aligned} \quad (120)$$

$$= \hat{i}(y_1z_2 - y_2z_1) - \hat{j}(x_1z_2 - x_2z_1) + \hat{k}(x_1y_2 - x_2y_1) \quad (121)$$

$$= \hat{i} \begin{vmatrix} y_1 & z_1 \\ y_2 & z_2 \end{vmatrix} - \hat{j} \begin{vmatrix} x_1 & z_1 \\ x_2 & z_2 \end{vmatrix} + \hat{k} \begin{vmatrix} x_1 & y_1 \\ x_2 & y_2 \end{vmatrix} \quad (122)$$

$$= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} \quad (123)$$

wobei in den letzten beiden Schritten der Laplacesche Entwicklungssatz für Determinanten „in Rückwärtsrichtung“ verwendet wurde. Je nach Geschmack kann man sich also eine dieser beiden Schreibweisen merken:

$$\vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1z_2 - y_2z_1 \\ x_2z_1 - x_1z_2 \\ x_1y_2 - x_2y_1 \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \end{vmatrix} \quad (124)$$

### 2.3.6 Spatprodukt

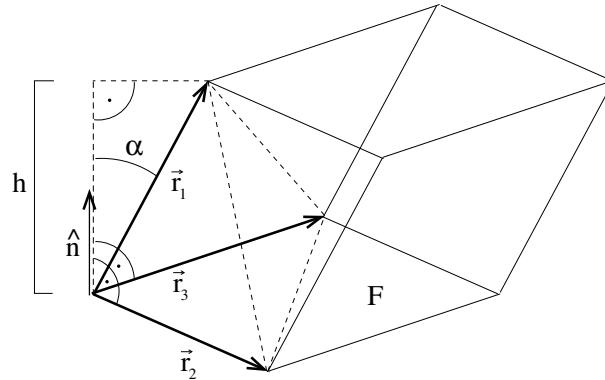
Das Spatprodukt (englisch: triple scalar product) ist definiert als:

$$\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) \quad (125)$$

Es kann aus den obigen Definitionen des Skalar- und Vektorprodukts ermittelt werden und liefert einen skalaren Wert:

$$\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) = \vec{r}_1 \cdot (F \hat{n}) = F |\vec{r}_1| |\hat{n}| \cos \alpha = F h \quad (126)$$

Dabei ist  $\alpha$  der Winkel zwischen den Vektoren  $\vec{r}_1$  und  $\hat{n}$ ,  $F$  die Fläche des von den Vektoren  $\vec{r}_2$  und  $\vec{r}_3$  aufgespannten Parallelogramms und  $h = |\vec{r}_1| \cos \alpha$  die Höhe des von  $\vec{r}_1$  über  $F$  aufgespannten Spats (Parallelepipeds):



Das Volumen dieses Spats (= Grundfläche mal Höhe) ist daher

$$V_{\text{Spat}} = |\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3)| \quad (127)$$

Dabei sind die Betragsstriche zu beachten, da natürlich  $V_{\text{Spat}} \geq 0$  gelten muß. Das Spatprodukt selbst kann positiv oder negativ sein, weil  $h$  in Gl. 126 je nach dem Vorzeichen von  $\cos \alpha$  ebenfalls positiv oder negativ sein kann. Wegen der Rechte-Hand-Regel des Vektorprodukts ergibt sich ein positives Vorzeichen, wenn  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  und  $\vec{r}_3$  in dieser Reihenfolge ein Rechtssystem bilden.

In geometrischen Anwendungen nützlich ist in diesem Zusammenhang, daß sich das Volumen des von den drei Vektoren  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  und  $\vec{r}_3$  aufgespannten Tetraeders einfach aus dem Spatvolumen errechnen läßt:

$$V_{\text{Tetraeder}} = \frac{1}{6} V_{\text{Spat}} \quad (128)$$

Die Darstellung des Spatprodukts in kartesischen Komponenten ergibt sich aus Gl. 104 und Gl. 123 zu:

$$\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} \quad (129)$$

Determinanten wechseln ihr Vorzeichen bei Vertauschung von zwei Zeilen (oder zwei Spalten) (siehe MfC2); daher bleiben sie bei zweimaliger Vertauschung von je zwei Zeilen unverändert. Deswegen ist das Spatprodukt nach Gl. 129 invariant bezüglich zyklischer Vertauschung der Vektoren:

$$\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) = \vec{r}_3 \cdot (\vec{r}_1 \times \vec{r}_2) = \vec{r}_2 \cdot (\vec{r}_3 \times \vec{r}_1) \quad (130)$$

Mit Hilfe der Kommutativität des Skalarprodukts und erneuter zyklischer Vertauschung gilt außerdem:

$$\vec{r}_1 \cdot (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) = (\vec{r}_2 \times \vec{r}_3) \cdot \vec{r}_1 = (\vec{r}_1 \times \vec{r}_2) \cdot \vec{r}_3 \quad (131)$$

Bei gleichbleibender Reihenfolge der Vektoren können also auch die beiden Produktzeichen vertauscht werden, ohne den Wert des Spatprodukts zu ändern. Dabei ist allerdings darauf zu achten, die Klammern stets um das Vektorprodukt zu setzen, da ein Ausdruck wie  $(\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2) \times \vec{r}_3$  völlig sinnlos wäre. Obwohl also in der oben aufgeführten Definition des Spatprodukts, Gl. 126, dem Vektor  $\vec{r}_1$  scheinbar eine Sonderrolle zukommt, spielen wegen dieser Vertauschungsinvarianzen tatsächlich alle drei Vektoren dieselbe Rolle.

*Spezialfall:* Das Spatprodukt wird Null, wenn einer der drei Vektoren  $\vec{r}_1$ ,  $\vec{r}_2$  und  $\vec{r}_3$  der Nullvektor ist, oder wenn die drei Vektoren in einer Ebene liegen (äquivalent: wenn zwei der drei Vektoren kollinear sind).

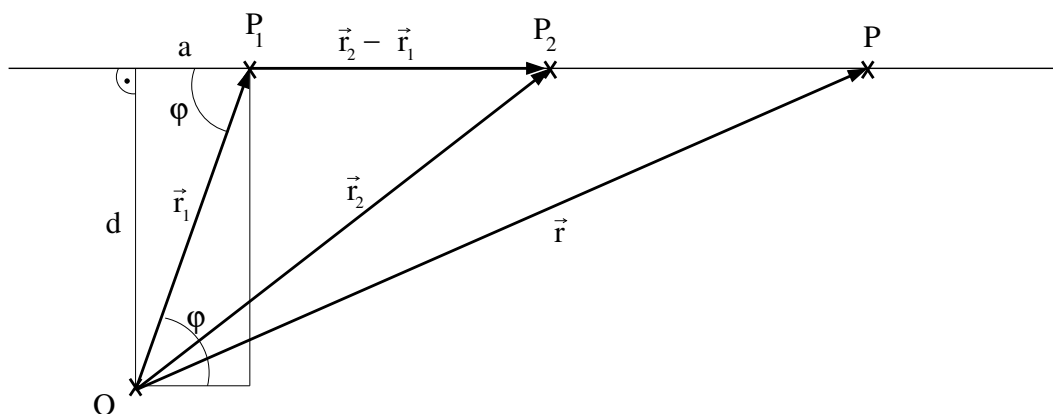
## 2.4 Geometrische Anwendungen

### 2.4.1 Geradengleichungen

#### Parameterform

Alle Punkte  $P$  (mit Ortsvektoren  $\vec{r} = \overrightarrow{OP}$ ) auf einer Geraden  $g$ , die durch die Punkte  $P_1$  (mit Ortsvektor  $\vec{r}_1 = \overrightarrow{OP_1}$ ) und  $P_2$  (mit Ortsvektor  $\vec{r}_2 = \overrightarrow{OP_2}$ ) geht, sind gegeben durch:

$$g: \vec{r} = \vec{r}_1 + \lambda (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{R}, \lambda \in ]-\infty, +\infty[ \quad (132)$$



Diese Form beschreibt eine Gerade auch in beliebig höherdimensionalen Räumen. Gl. 132 lässt sich umschreiben zu

$$(\vec{r} - \vec{r}_1) = \lambda (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad (133)$$

was der Bedingung

$$(\vec{r} - \vec{r}_1) \parallel (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad (134)$$

entspricht.

#### Parameterfreie Form

Die Bedingung Gl. 134 lässt sich nach Gl. 112 auch mit Hilfe des Vektorprodukts ausdrücken:

$$g: (\vec{r} - \vec{r}_1) \times (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) = \vec{0} \quad (135)$$

Weil man das Vektorprodukt mit Hilfe einer Determinante ausrechnen kann, heißt diese Form der Geradengleichung auch Determinantenform. Da das Vektorprodukt (zumindest

in der in Abschnitt 2.3.5 vorgestellten Form) nur in 3 Dimensionen definiert ist, gilt diese Form der Geradengleichung ebenfalls nur im 3D-Raum.

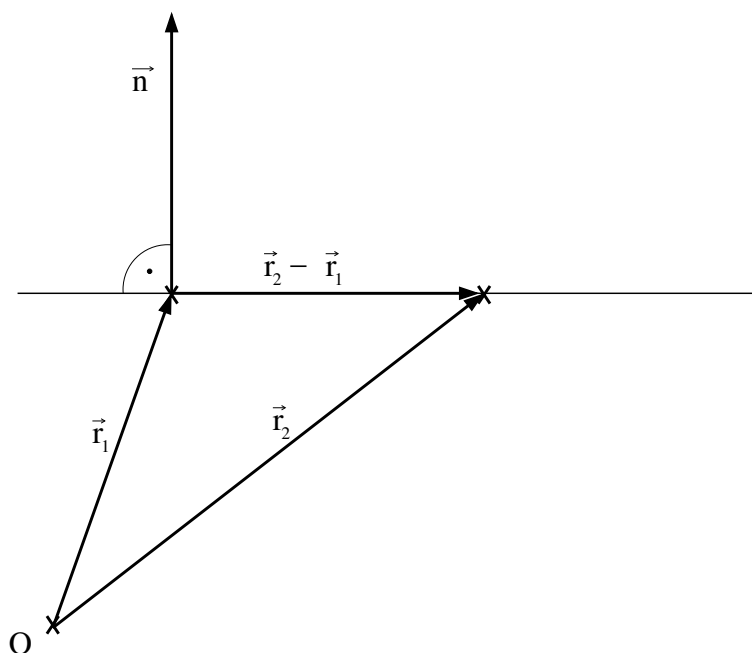
### Normalenform

Im 2D-Raum (*nicht* in 3D oder höheren Dimensionen) gibt es *eine* eindeutige Senkrechte zu einer Geraden, d.h. die Bedingung

$$\vec{n} \perp (\vec{r} - \vec{r}_1) \quad (136)$$

definiert (bis auf Vorzeichen und Länge, die hier irrelevant sind) eindeutig einen Normalenvektor  $\vec{n}$ . Die Bedingung Gl. 136 kann man auch mit Hilfe des Skalarprodukts (siehe Gl. 98) ausdrücken:

$$g : \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1) = 0 \quad (137)$$



Wenn man in dieser Normalenform den Normalenvektor normiert und das Produkt dieses normierten Normalenvektors mit dem Vektor  $\vec{r}_1$  explizit ausrechnet, erhält man als Spezialfall die Hessesche Normalenform:

$$g : \hat{n} \cdot \vec{r} = d \quad (138)$$

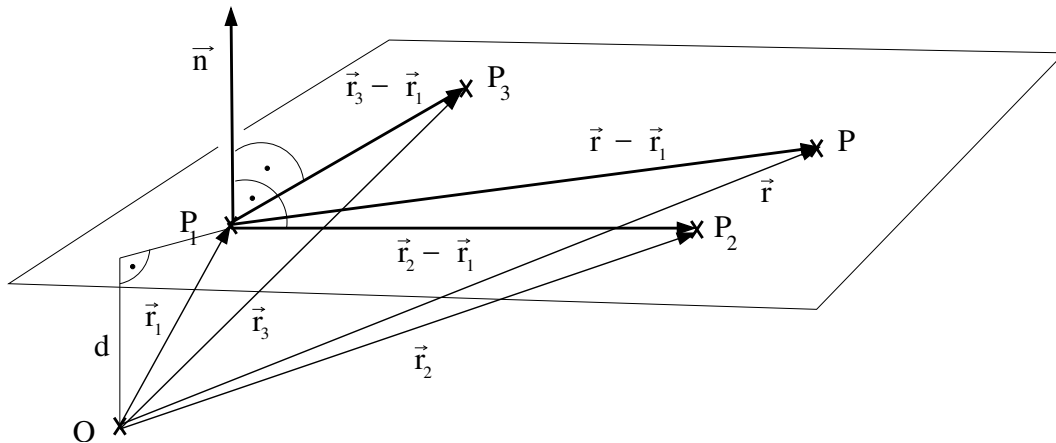
Der Skalar  $d = \hat{n} \cdot \vec{r}_1$  gibt dabei den (üblichen senkrechten) Abstand der Geraden vom Ursprung an, da es sich dabei offensichtlich um die Projektion des Vektors  $\vec{r}_1$  auf die zur Geraden senkrechte Richtung handelt (vgl. Bild auf S. 20; alternative Formel für diesen Abstand: siehe Abschnitt 2.4.4).

## 2.4.2 Ebenengleichungen

### Parameterform

In perfekter Analogie zu Parameterform für eine Gerade, Gl. 132, lässt sich auch die Gleichung einer Ebene  $e$  formulieren:

$$e : \vec{r} = \vec{r}_1 + \lambda (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) + \mu (\vec{r}_3 - \vec{r}_1) \quad \text{mit } \lambda, \mu \in \mathbb{R}, \lambda, \mu \in ] -\infty, +\infty[ \quad (139)$$



Dies läßt sich wiederum umschreiben zu

$$(\vec{r} - \vec{r}_1) = \lambda (\vec{r}_2 - \vec{r}_1) + \mu (\vec{r}_3 - \vec{r}_1) \quad (140)$$

Was anschaulich bedeutet, daß sich *alle* Vektoren  $(\vec{r} - \vec{r}_1)$  in der Ebene  $e$  als Linearkombination der beiden Vektoren  $(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$  und  $(\vec{r}_3 - \vec{r}_1)$  ausdrücken lassen. Formal betrachtet bilden also  $(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$  und  $(\vec{r}_3 - \vec{r}_1)$  einen vollständigen Satz von Basisvektoren für den 2-dimensionalen Raum dieser Ebene (näheres dazu in MfC2, Kapitel Vektorräume). Dies funktioniert offensichtlich nur dann, wenn  $(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$  und  $(\vec{r}_3 - \vec{r}_1)$  *nicht* parallel zueinander sind (nicht kollinear sind), sonst ist einer dieser beiden Vektoren redundant und die Ebenengleichung entartet zu einer Geradengleichung.

Gl. 139 beschreibt eine Ebene auch in beliebig höherdimensionalen Räumen.

## Normalenform

Die Normalenform einer Gerade, Gl. 137, beschreibt im 3D-Raum „automatisch“ eine Ebene:

$$e : \vec{n} \cdot (\vec{r} - \vec{r}_1) = 0 \quad (141)$$

da sie in beiden Fällen lediglich bestimmt, daß der Vektor  $(\vec{r} - \vec{r}_1)$  senkrecht zum Normalenvektor  $\vec{n}$  stehen soll. Im noch höherdimensionalen Fall eines  $n$ -dimensionalen Raums würden wir damit  $(n - 1)$ -dimensionale Hyperebenen erhalten.

Ebenso beschreibt auch die Hessesche Normalenform in 3D eine Ebene mit Abstand  $d$  vom Ursprung:

$$e : \hat{n} \cdot \vec{r} = \hat{n} \cdot \vec{r}_1 = d \quad (142)$$

Das das Vektorprodukt zweier Vektoren einen dritten Vektor liefert, der auf den ersten beiden senkrecht steht, können wir einen (speziellen) Normalenvektor einer nach Gl. 139 gegebenen Ebene durch das Vektorprodukt der beiden in dieser Ebene liegenden Vektoren  $(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)$  und  $(\vec{r}_3 - \vec{r}_1)$  erzeugen. Gl. 141 wird dadurch zu:

$$e : (\vec{r} - \vec{r}_1) \cdot [(\vec{r}_2 - \vec{r}_1) \times (\vec{r}_3 - \vec{r}_1)] = 0 \quad (143)$$

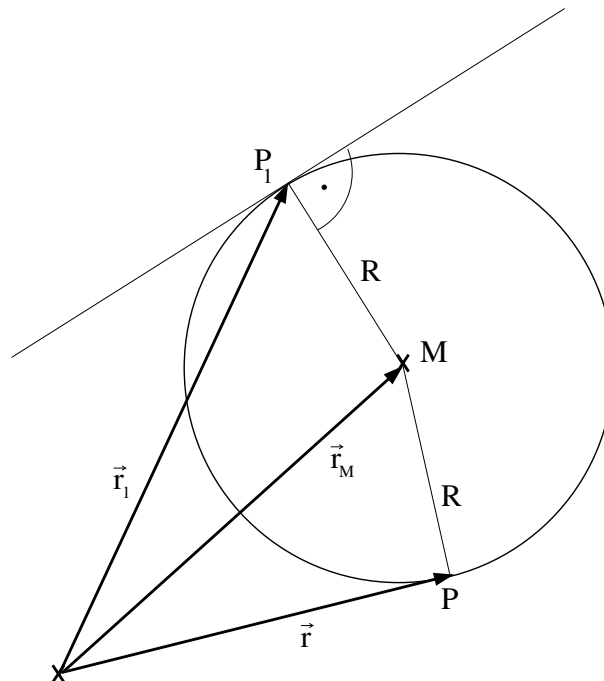
Dabei handelt es sich offenbar um ein Spatprodukt. Diese Form der Ebenengleichung nutzt also aus, daß ein Spatprodukt Null wird, wenn die drei daran beteiligten Vektoren in einer Ebene liegen (siehe S. 20).

### 2.4.3 Kugelgleichung

Die Gesamtheit aller Punkte  $P$  (mit Ortsvektoren  $\vec{r} = \overrightarrow{OP}$ ), die von einem Mittelpunkt  $P_M$  (mit Ortsvektor  $\vec{r}_M = \overrightarrow{OP_M}$ ) den gleichen Abstand  $R$  haben, liegen auf einer Kreisperipherie (in 2D) bzw. einer Kugeloberfläche (in 3D). Wegen Gl. 94 lautet daher die Gleichung für eine Kreisperipherie bzw. Kugeloberfläche mit Radius  $R$ :

$$K : (\vec{r} - \vec{r}_M)^2 = R^2 \quad (144)$$

(Beachte: Die mit der Quadrierung (Skalarprodukt!) verbundene Betragsbildung ist dabei elementar wichtig. Eine Gleichung wie  $\vec{r} - \vec{r}_M = \vec{R}$  könnte immer nur einen einzigen Punkt auf dem Kreis bzw. der Kugel beschreiben, da der Radiusvektor  $\vec{R}$  neben seiner Länge auch noch Richtungsinformation enthält.)



Ausgeschrieben in kartesischen Komponenten ergibt sich also für eine Kugeloberfläche:

$$(x - x_M)^2 + (y - y_M)^2 + (z - z_M)^2 = R^2 \quad (145)$$

Für geometrische Anwendungen interessant ist die Tatsache, daß sich mit den hier gezeigten Mitteln Tangenten an Kreise bzw. Tangentialebenen an Kugeln sehr leicht erhalten lassen: Ist bekannt, daß ein Punkt  $P_1$  auf dem Kreis bzw. der Kugel  $K$  liegt, ist der Vektor  $\overrightarrow{MP_1}$  vom Mittelpunkt zu diesem Punkt offenbar ein Normalenvektor der Tangente bzw. der Tangentialebene (und der Ortsvektor  $\overrightarrow{OP_1}$  des Punktes  $P_1$  ein Punkt auf der Tangente bzw. der Tangentialebene), sodaß sich diese sofort in Normalenform, Gl. 137 bzw. 141, hinschreiben läßt.

### 2.4.4 Abstandsformeln

#### Abstand einer Geraden vom Ursprung

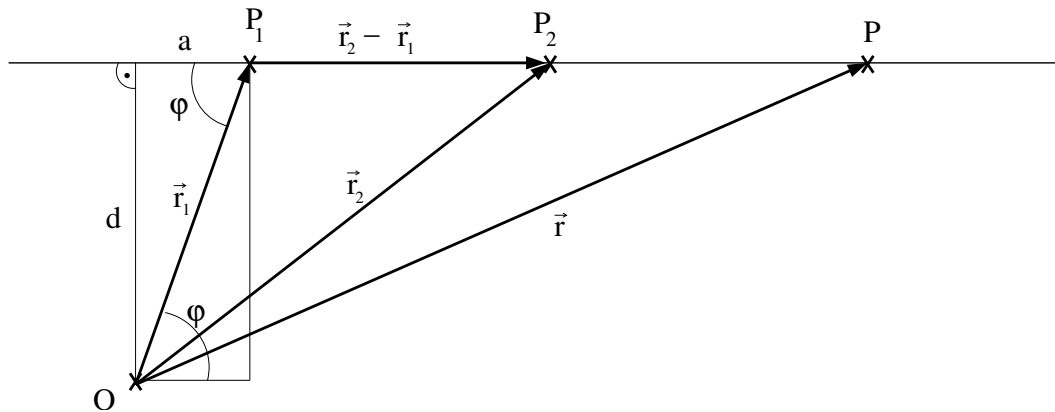
Im 2D-Fall ergibt sich dieser Abstand direkt aus der Hesseschen Normalenform Gl. 138, wie dort bereits erklärt. Wenn kein Normalenvektor der Geraden vorliegt, sondern die

Gerade in Parameterform Gl. 132 gegeben ist, kann man auch aus den dabei auftretenden Größen den Abstand vom Ursprung berechnen:

$$d = \sqrt{r_1^2 - a^2} \quad (146)$$

$$= \sqrt{\vec{r}_1^2 - \left[ \vec{r}_1 \cdot \frac{(\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}{|\vec{r}_2 - \vec{r}_1|} \right]^2} \quad (147)$$

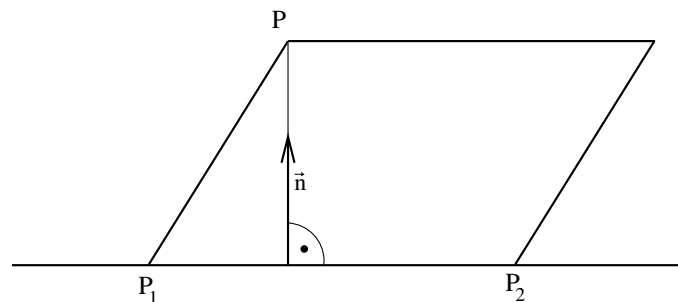
wobei  $a$  die Projektion des Vektors  $\vec{r}_1$  auf die Gerade darstellt und der Satz des Pythagoras ausgenutzt wird:



### Abstand Punkt–Gerade

Der Abstand irgendeines Punktes  $P$  (nicht notwendigerweise des Ursprungs) von einer Geraden, die durch die Punkte  $P_1$  und  $P_2$  geht, läßt sich gemäß der Beziehung „Fläche eines Parallelogramms = Höhe mal Grundseite“ ermitteln als Quotient „Fläche des Parallelogramms / Grundseite“, also

$$d = \frac{|\overrightarrow{P_1P} \times \overrightarrow{P_1P_2}|}{|\overrightarrow{P_1P_2}|} \quad (148)$$



Ist die Gerade im 2D-Fall in Normalenform gegeben, ergibt sich der Abstand durch Projektion des Vektors  $\overrightarrow{P_1P}$  auf die Richtung des Normalenvektors (also auf den Normaleinheitsvektor):

$$d = \overrightarrow{P_1P} \cdot \hat{n} = \overrightarrow{P_1P} \cdot \vec{n} / |\vec{n}| \quad (149)$$

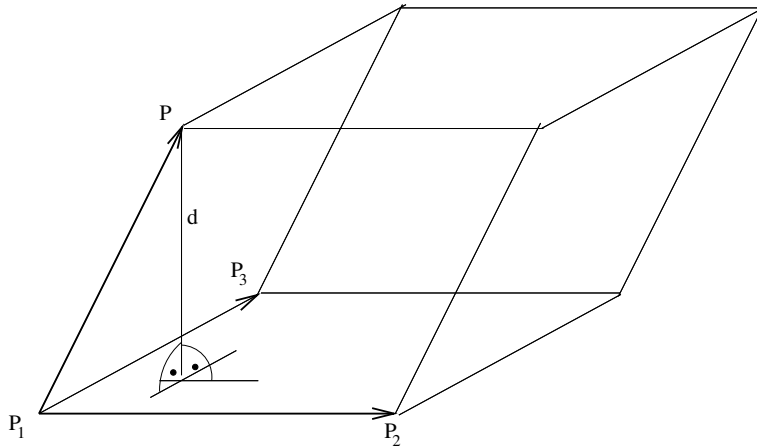
### Abstand einer Ebene vom Ursprung

Im 3D-Fall ergibt sich dieser Abstand direkt aus der Hesseschen Normalenform Gl. 142, in Analogie zur Geraden. Liegt die Ebenengleichung in Parameterform vor, empfiehlt sich eine Transformation auf die Normalenform (eine Konstruktion analog zu Gl. 147 würde letztlich auch wieder den Normalenvektor benötigen).

### Abstand Punkt–Ebene

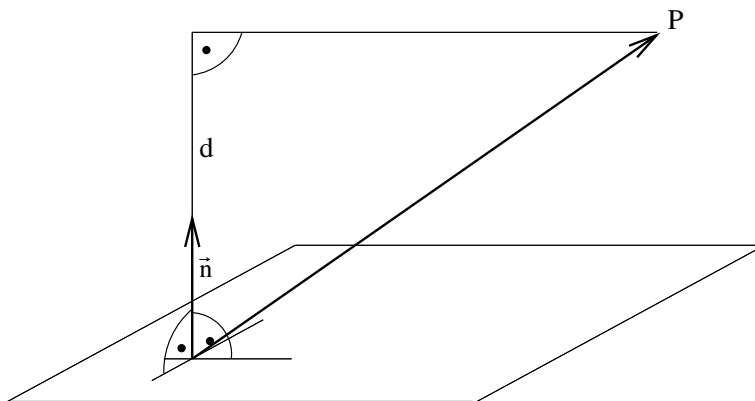
Der Abstand irgendeines Punktes  $P$  (nicht notwendigerweise des Ursprungs) von einer Ebene, die durch die Punkte  $P_1$ ,  $P_2$  und  $P_3$  geht, läßt sich gemäß der Beziehung „Volumen eines Spats = Höhe mal Grundfläche“ ermitteln als Quotient „Volumen des Spats / Grundfläche“, also

$$d = \frac{|\overrightarrow{P_1P} \cdot (\overrightarrow{P_1P_2} \times \overrightarrow{P_1P_3})|}{|\overrightarrow{P_1P_2} \times \overrightarrow{P_1P_3}|} \quad (150)$$



Ist die Ebene im 3D-Fall in Normalenform gegeben, ergibt sich der Abstand durch Projektion des Vektors  $\overrightarrow{P_1P}$  auf die Richtung des Normalenvektors (also auf den Normaleinheitsvektor):

$$d = \overrightarrow{P_1P} \cdot \hat{n} = \overrightarrow{P_1P} \cdot \vec{n} / |\vec{n}| \quad (151)$$



### Abstand zweier paralleler Geraden

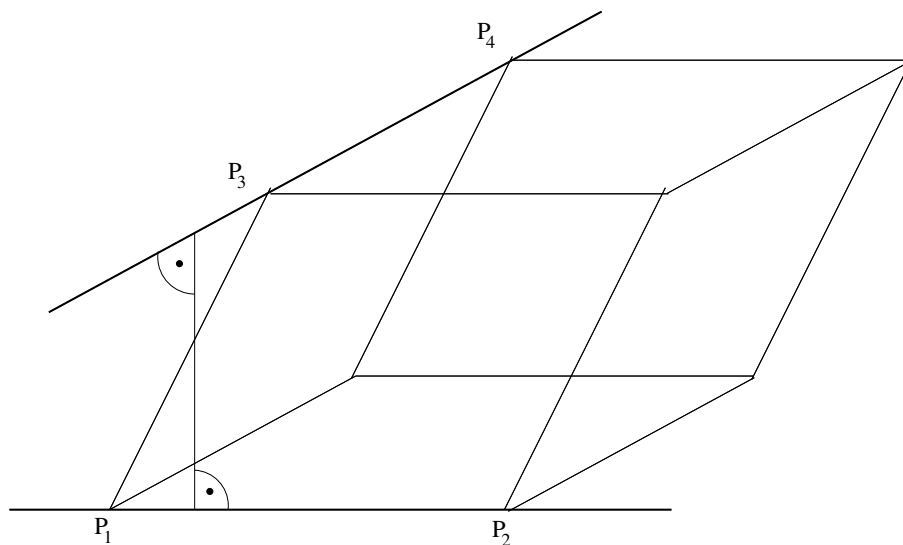
Hat man zwei Punkte  $P_1$  und  $P_2$  auf der einen Geraden und einen weiteren Punkt  $P$  auf der anderen Geraden, kann man Gl. 148 verwenden.



### Abstand zweier windschiefer Geraden

Die Punkte  $P_1$  und  $P_2$  liegen auf der einen Geraden, die Punkte  $P_3$  und  $P_4$  auf der anderen Geraden. Dann spannen die Vektoren  $\overrightarrow{P_1P_2}$  und  $\overrightarrow{P_1P_3}$  sowie der auf den Startpunkt  $P_1$  parallelverschobene Vektor  $\overrightarrow{P_3P_4}$  einen Spat auf, sodaß der Abstand der Geraden wieder als Höhe in diesem Spat in Analogie zu Gl. 150 berechnet werden kann:

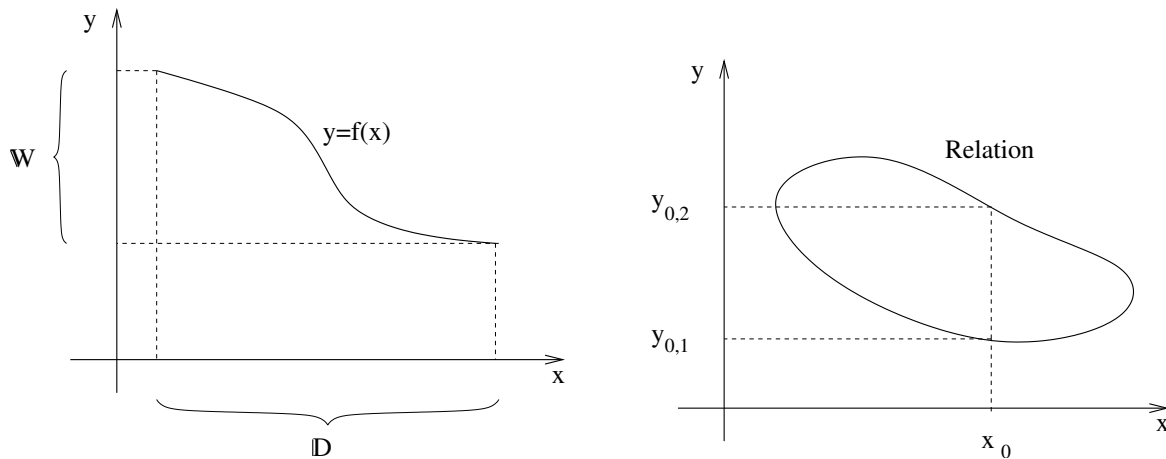
$$d = \frac{|\overrightarrow{P_1P_3} \cdot (\overrightarrow{P_1P_2} \times \overrightarrow{P_3P_4})|}{|\overrightarrow{P_1P_2} \times \overrightarrow{P_3P_4}|} \quad (152)$$



### 3 Funktionen

#### 3.1 Funktionsbegriff

Eine reelle Funktion einer reellen Variablen ist eine Vorschrift, die jedem Element  $x$  einer reellen Zahlenmenge eindeutig ein Element  $y = f(x)$  einer reellen Zahlenmenge zuordnet (nicht-eindeutige Zuordnungen sind keine Funktionen, sondern Relationen). Dabei kann die unabhängige Variable  $x$  frei aus dem Definitionsbereich  $\mathbb{D}$  gewählt werden. Die resultierenden Werte der abhängigen Variablen  $y$  liegen dann im Wertebereich  $\mathbb{W}$ .



Darstellungsmöglichkeiten von Funktionen: graphisch, tabellarisch, algebraisch. Die algebraische Darstellung kann explizit ( $y = f(x)$ ) oder implizit ( $F(x, y) = 0$ ) sein; im letzteren Fall ist besonders auf Eindeutigkeit zu achten. Als Beispiel dazu betrachten wir die folgende implizite Verknüpfung zwischen  $x$  und  $y$ :

$$x - y^2 - 1 = 0 \quad (153)$$

Sie kann offenbar umgeformt werden zu

$$y^2 = x - 1 \quad (154)$$

ist dann aber immer noch implizit, da nicht  $y$  sondern nur  $y^2$  direkt gegeben ist. Bei Beschränkung auf reelle Zahlen ist nach Gl. 154 der Definitionsbereich offenbar immer

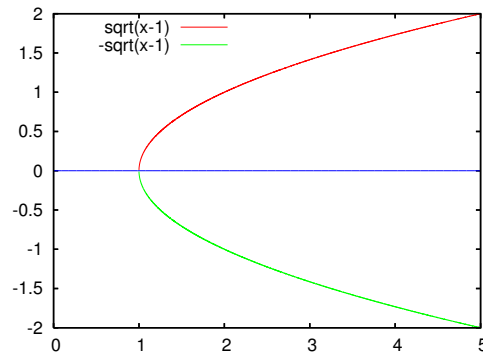
$$\mathbb{D} = \{x \in \mathbb{R} \mid x \geq 1\} \quad (155)$$

Durch Einschränkung des Wertebereichs lassen sich hier (eindeutige) Funktionen gewinnen: Beschränkung auf

$$\mathbb{W} = \{y \in \mathbb{R} \mid y \geq 0\} \quad \text{liefert} \quad y = +\sqrt{x-1} \quad (156)$$

$$\mathbb{W} = \{y \in \mathbb{R} \mid y \leq 0\} \quad \text{liefert} \quad y = -\sqrt{x-1} \quad (157)$$

was dem positiven bzw. negativen Teilstück einer liegenden Parabel entspricht:



Beide Teilläste zusammen wären durch

$$y = \pm\sqrt{x-1} \quad (158)$$

gegeben, was jedoch offenbar keine Funktion ist, da ein gegebenes  $x$  i.A. nicht eindeutig ein einziges  $y$  bestimmt.

### 3.1.1 Elementare Eigenschaften von Funktionen

#### Symmetrie: gerade/ungerade

Gerade Funktionen sind achsensymmetrisch zur  $y$ -Achse:

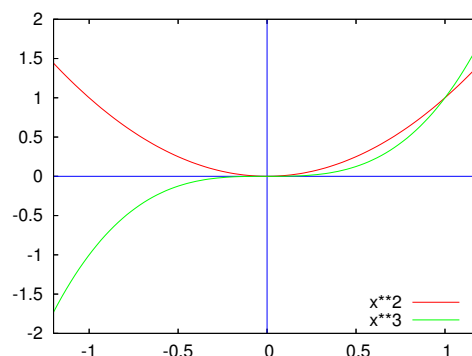
$$f(x) = f(-x) \quad (159)$$

Ungerade Funktionen sind punktsymmetrisch zum Ursprung:

$$f(x) = -f(-x) \quad (160)$$

(jeweils für alle  $x \in \mathbb{D}$ ).

Als Beispiel betrachten wir  $y = x^2$  für eine gerade Funktion und  $y = x^3$  für eine ungerade Funktion (siehe Abbildung). Etwas allgemeiner sind alle Funktionen  $y = x^{2n}$  (mit  $n \in \mathbb{Z}$ ) gerade und alle Funktionen  $y = x^{2n+1}$  ungerade.



Natürlich gibt es auch Funktionen, die weder gerade noch ungerade sind. Für sie gilt folgender Satz:

*Satz:* Jede Funktion läßt sich als Summe einer geraden Funktion  $g(x)$  und einer ungeraden Funktion  $u(x)$  darstellen.

Für jedes  $f(x)$  gilt also:

$$f(x) = g(x) + u(x) \quad (161)$$

Wegen der Definition von  $g(x)$  und  $u(x)$  folgt daraus:

$$f(-x) = g(x) - u(x) \quad (162)$$

Durch Bildung der Summe bzw. Differenz dieser beiden Gln. 161 und 162 ergeben sich diese allgemeinen Bestimmungsgleichungen für  $g(x)$  und  $u(x)$ :

$$g(x) = \frac{1}{2}(f(x) + f(-x)) \quad (163)$$

$$u(x) = \frac{1}{2}(f(x) - f(-x)) \quad (164)$$

### Symmetrie: Periodizität

Eine Funktion mit der Eigenschaft

$$f(x) = f(x + p) \quad \text{für alle } x \in \mathbb{D} \quad (165)$$

heißt periodisch mit der Periode  $p$ . Dies entspricht einer Translationssymmetrie in Richtung der  $x$ -Achse.

### Monotonie

Eine Funktion  $y = f(x)$  heißt in einem Intervall  $[a, b]$

$$\text{streng monoton steigend, wenn } f(x_1) < f(x_2) \quad (166)$$

$$\text{monoton steigend, wenn } f(x_1) \leq f(x_2) \quad (167)$$

$$\text{streng monoton fallend, wenn } f(x_1) > f(x_2) \quad (168)$$

$$\text{monoton fallend, wenn } f(x_1) \geq f(x_2) \quad (169)$$

für alle  $x_1 < x_2$  im Intervall  $[a, b]$  gilt.

#### 3.1.2 Umkehrfunktion

Eine Funktion  $y = f(x)$  bildet die unabhängige Variable  $x$  auf die abhängige Variable  $y$  ab:

$$x \xrightarrow{f} y \quad (170)$$

Die dazugehörige Umkehrfunktion (inverse Funktion)  $y = f^{-1}(x)$  bildet  $y$  auf  $x$  ab:

$$y \xrightarrow{f^{-1}} x \quad (171)$$

Um die Konvention beizubehalten, daß die unabhängige Variable  $x$  und die abhängige Variable  $y$  heißt, kann man in Gl. 171 auch die Variablennamen vertauschen:

$$x \xrightarrow{f^{-1}} y \quad (172)$$

was natürlich nichts daran ändert, was  $f^{-1}$  bewirkt. Insbesondere macht  $f$  die Wirkung von  $f^{-1}$  rückgängig (bzw. umgekehrt):

$$f(f^{-1}(x)) = f^{-1}(f(x)) = x \quad (173)$$

Graphisch entspricht die Bildung der Umkehrfunktion einer Spiegelung an der 1. Winkelhalbierenden (Gerade  $y = x$ ). Entsprechend vertauschen sich bei der Bildung der Umkehrfunktion Definitions- und Wertebereich.

Wegen der notwendigen Eindeutigkeit jeder Funktion ist jedoch zu beachten, daß eine Funktion nur in einem Bereich umgekehrt werden kann, in dem sie streng monoton ist (streng monoton steigend oder streng monoton fallend). Nur dort existiert eine eindeutige (umkehrbar eindeutige) Zuordnung zwischen  $x$  und  $y$ .

Daher ist folgendes Praxisrezept für die Bildung der Umkehrfunktion einzuhalten:

- Überprüfung der Monotie-Eigenschaften der Funktion  $f(x)$ ;  
ggf. Auswahl eines streng monotonen Intervalls;
- Vertauschung von  $x$  und  $y$ ;
- Auflösen nach  $y$ .

### 3.1.3 Ganze rationale Funktionen (Polynome)

Ein Polynom  $P_n(x)$  des Grades  $n$  in der Variablen  $x$  ist definiert als:

$$y = P_n(x) = \sum_{k=0}^n a_k x^k \quad \text{mit } k, n \in \mathbb{N}, a_k \in \mathbb{R}, a_n \neq 0 \text{ und } a_k = 0 \text{ für } k \geq n+1 \quad (174)$$

Von großer theoretischer und praktischer Bedeutung sind die Nullstellen der Polynome. Für Polynome 1. und 2. Grades gibt es einfache Formeln für die Nullstellen:

$$a_0 + a_1 x = 0 \rightarrow x = -a_0/a_1 \quad (175)$$

$$a_0 + a_1 x + a_2 x^2 = 0 \rightarrow x_{1,2} = \frac{1}{2a_2} \left( -a_1 \pm \sqrt{a_1^2 - 4a_0a_2} \right) \quad (176)$$

$$x^2 + px + q = 0 \rightarrow x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \quad (177)$$

Für Polynome 3. und 4. Grades existieren ebenfalls allgemeine Formeln, die jedoch komplizierter in Aussehen und Anwendung sind. Für diese Fälle wie auch für Polynome 5. und höheren Grades empfiehlt sich in der Praxis das Raten von Nullstellen und das Abspalten geratener Nullstellen durch Polynomdivision (s.u.).

### Fundamentalsatz der Algebra

Betrachten wir als temporären Exkurs komplexwertige Polynome einer komplexen Variablen  $z$ :

$$P_n(z) = \sum_{k=0}^n a_k z^k \quad \text{mit } z \in \mathbb{C} \quad \text{aber } a_k \in \mathbb{R} (!) \quad (178)$$

Der Fundamentalsatz der Algebra besagt, daß sich ein solches Polynom in genau  $n$  Linearfaktoren zerlegen läßt:

$$P_n(z) = a_n \prod_{k=1}^n (z - \alpha_k) = a_n (z - \alpha_1)(z - \alpha_2) \cdots (z - \alpha_n) \quad (179)$$

wobei die komplexen  $\alpha_k$  die genau  $n$  Nullstellen des Polynoms sind:

$$P_n(\alpha_k) = 0, \text{ für } k = 1, 2, \dots, n; \alpha_k \in \mathbb{C} \quad (180)$$

Dabei können auch einzelne, mehrere oder alle Nullstellen  $\alpha_k$  gleich sein, also zu entsprechend mehrfachen Nullstellen zusammenfallen (entarten).

Besitzt ein solches Polynom, wie hier dargestellt, nur rein reelle Koeffizienten  $a_k$ , so kann man leicht beweisen, daß zu jeder komplexen Nullstelle  $\alpha$  auch die konjugiert komplexe Nullstelle  $\alpha^*$  existiert:

$$P_n(\alpha) = 0 \quad \Rightarrow \quad P_n(\alpha^*) = 0, \quad \text{für } a_k \in \mathbb{R} \quad (181)$$

Daraus ergeben sich mehrere Folgerungen:

1. Ist  $n$  ungerade, so existiert mindestens eine reelle Nullstelle.
2. Nichtreelle Nullstellen treten stets paarweise auf:  $(\alpha, \alpha^*)$
3. Der Fundamentalsatz der Algebra läßt sich auch rein reell formulieren, wenn man die Linearfaktoren der paarweisen Nullstellen  $(\alpha, \alpha^*)$  zu quadratischen Faktoren zusammenzieht:

$$(x - \alpha)(x - \alpha^*) = x^2 - (\alpha + \alpha^*)x + \alpha\alpha^* = x^2 + bx + c \quad \text{mit } b, c \in \mathbb{R} \quad (182)$$

wobei ausgenutzt wurde, daß sowohl  $\alpha + \alpha^*$  als auch  $\alpha\alpha^*$  rein reelle Größen sind:

$$b = -2 \operatorname{Re}(\alpha) \quad , \quad c = |\alpha|^2 \quad (183)$$

In dieser reellen Form lautet der Fundamentalsatz der Algebra: Jedes Polynom  $n$ -ten Grades läßt sich in ein Produkt aus Linearfaktoren und quadratischen Polynomen zerlegen:

$$P_n(x) = a_n (x - r_1)(x - r_2) \cdots (x^2 + b_1x + c_1)(x^2 + b_2x + c_2) \cdots \quad \text{mit } r_i, b_i, c_i \in \mathbb{R} \quad (184)$$

sodaß sich genau  $k$  Linearfaktoren (für die reellen Nullstellen) und  $m$  quadratische Polynome (für die paarweisen komplexen / konjugiert komplexen Nullstellen) ergeben. Dabei muß gelten:

$$k + 2m = n \quad (185)$$

sodaß wir wiederum zur selben Anzahl von genau  $n$  (möglicherweise komplexen) Nullstellen kommen (die ggf. auch zusammenfallen können: vielfache Nullstellen).

## Polynomdivision

Der Fundamentalsatz der Algebra garantiert, daß wir für eine (wie auch immer bestimmte, z.B. auch erratene) Nullstelle (hier  $x = r$ ) stets den entsprechenden Linearfaktor ohne

Rest abspalten können und so ein Polynom mit einem um eins niedrigeren Grad erhalten (wodurch sich das Auffinden weiterer Nullstellen ggf. erleichtert):

$$P_n(x) = (x - r) P_{n-1}(x) \quad (186)$$

Das neue Polynom ergibt sich also durch eine Division:

$$P_{n-1}(x) = P_n(x)/(x - r) \quad (187)$$

Diese Division läßt sich analog dem Schema der Zahlendivision durchführen (siehe Vorlesung).

### 3.1.4 Gebrochen rationale Funktionen

Gebrochen rationale Funktionen sind Quotienten aus rationalen Funktionen (Polynomen):

$$y = R_m^n(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} \quad (188)$$

mit einem Zählerpolynom  $P_n(x)$  des Grades  $n$  und einem Nennerpolynom des Grades  $m$  ( $n, m \in \mathbb{N}_0$ , wobei für  $m = 0$  offenbar die gebrochen rationale Funktion zu einer ganzen rationalen Funktion (Polynom) entartet).

Der Grad der Gesamtfunktion ist unklar; als praktisch sinnvoller erweist sich die Frage, wie sich der Grad des Zähler- und Nennerpolynoms unterscheiden: Bei echt gebrochen rationalen Funktionen gilt  $m > n$ . Im Grenzfall  $x \rightarrow \pm\infty$  gilt daher  $y \rightarrow 0$ , d.h. die  $x$ -Achse ( $y = 0$ ) ist (waagerechte) Asymptote.

Im Fall  $n \geq m$  liegt eine unecht gebrochen rationale Funktion vor. Sie kann durch Polynomdivision in eine Summe aus einer ganzen rationalen Funktion (Polynom) und einer echt gebrochen rationalen Funktion umgeformt werden. Da der echt gebrochen rationale Anteil für  $x \rightarrow \pm\infty$  gegen Null geht (s.o.), stellt der ganze rationale Anteil die asymptotische Näherungskurve dar. Bei  $n = m$  ist dies wiederum eine waagerechte Asymptote ( $y = \text{const.}$ , allerdings i.A. verschieden von  $y = 0$ ), bei  $n = m + 1$  eine Gerade (schräge Asymptote), in anderen Fällen ein asymptotisches Näherungspolynom höherer Ordnung.

Nullstellen des Zählerpolynoms sind Nullstellen der Gesamtfunktion, wenn das Nennerpolynom an diesen Stellen verschieden von Null ist.

An den Nullstellen des Nennerpolynoms ist die Gesamtfunktion nicht definiert. Wenn eine (einfache oder mehrfache) Nullstelle  $x = r$  des Nenners auch (einfache oder mehrfache) Nullstelle des Zählers ist, können entsprechende (einfache oder mehrfache) Faktoren  $(x - r)$  gemäß Gl. 179 bzw. 184 aus Zähler und Nenner abgespalten und herausgekürzt werden. Verschwindet dadurch diese Nullstelle aus Zähler und Nenner vollständig, bezeichnet man diese Stelle als hebbare Unstetigkeit (stetig behebbare Unstetigkeitsstelle). Verbleiben danach Faktoren  $(x - r)$  im Zähler, liegt eine echte Nullstelle der Gesamtfunktion bei  $x = r$  vor. Verbleiben danach Faktoren  $(x - r)$  im Nenner, handelt es sich bei  $x = r$  um eine (einfache oder mehrfache) Polstelle. An dieser Stelle geht die Funktion gegen  $+\infty$  oder  $-\infty$ . Tritt der Faktor  $(x - r)$  im Nenner  $k$ -fach auf und ist  $k$  eine ungerade Zahl, handelt es sich um eine ungerade Polstelle, an der die Funktion ihr Vorzeichen wechselt. Anderenfalls liegt eine gerade Polstelle ohne Vorzeichenwechsel vor.

## Partialbruchzerlegung

Betrachten wir (wie schon beim Fundamentalsatz der Algebra) für einen Moment eine Erweiterung auf komplexwertige gebrochen rationale Funktionen einer komplexen Variablen  $z$ , aber mit reellen Koeffizienten:

$$R_m^n(z) = \frac{P_n(z)}{Q_m(z)} \quad \text{mit } z \in \mathbb{C} \quad \text{aber } a_k \in \mathbb{R} (!) \quad (189)$$

Nach dem Fundamentalsatz der Algebra Gl. 179 besitzt das Nennerpolynom eine Produktdarstellung:

$$Q_m(z) = a_n(z - z_1)^{v_1}(z - z_2)^{v_2} \cdots (z - z_k)^{v_k} \quad (190)$$

wobei die Summe der Vielfachheiten  $v_i$  der Nullstellen  $z_i$  den Grad des Nennerpolynoms ergibt:

$$v_1 + v_2 + \cdots + v_k = m \quad (191)$$

Man kann beweisen daß dann die gesamte gebrochen rationale Funktion  $R(z)$  folgende Summendarstellung hat:

$$R(z) = \frac{a_{11}}{(z - z_1)} + \frac{a_{12}}{(z - z_1)^2} + \cdots + \frac{a_{1v_1}}{(z - z_1)^{v_1}} \quad (192)$$

$$+ \frac{a_{21}}{(z - z_2)} + \frac{a_{22}}{(z - z_2)^2} + \cdots + \frac{a_{2v_2}}{(z - z_2)^{v_2}} \quad (193)$$

$$+ \cdots \quad (194)$$

$$+ \frac{a_{k1}}{(z - z_k)} + \frac{a_{k2}}{(z - z_k)^2} + \cdots + \frac{a_{kv_k}}{(z - z_k)^{v_k}} \quad \text{mit } a_{ij} \in \mathbb{C} \quad (195)$$

Bei rein reellen Koeffizienten im Zähler- und Nennerpolynom treten die komplexen Nenner-Nullstellen immer als konjugiert komplexe Paare auf ( $z_0$  und  $z_0^*$ , s.o. Fundamentalsatz der Algebra, S. 31) und die zugehörigen Koeffizienten  $a_{ij}$  ebenfalls. Dann kann man die komplexen Terme paarweise zusammenfassen, wie hier für die Vielfachheit  $v_i = 1$  beispielhaft gezeigt:

$$\frac{a}{z - z_0} + \frac{a^*}{z - z_0^*} = \frac{a(z - z_0^*) + a^*(z - z_0)}{(z - z_0)(z - z_0^*)} \quad (196)$$

$$= \frac{(a + a^*)z - az_0^* - a^*z_0}{z^2 - (z_0 + z_0^*)z + z_0z_0^*} \quad (197)$$

$$= \frac{\alpha z + \beta}{z^2 + \gamma z + \delta} \quad (198)$$

$$\text{mit } \alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{R} \quad \text{und } \alpha = 2 \operatorname{Re}(a), \quad (199)$$

$$\beta = -2 \operatorname{Re}(az_0), \quad \gamma = -2 \operatorname{Re}(z_0), \quad \delta = |z_0|^2 \quad (200)$$

Die obige komplexe Partialbruchzerlegung läßt sich im Reellen daher folgendermaßen formulieren: Jede *echt* gebrochen rationale Funktion (Gl. 188 mit  $m > n$ ) läßt sich folgendermaßen zerlegen:

$$R(x) = \frac{P_n(x)}{Q_m(x)} = \frac{A_1}{x - a} + \frac{A_2}{(x - a)^2} + \cdots + \frac{A_\alpha}{(x - a)^\alpha} \quad (201)$$

$$+ \cdots \quad (202)$$

$$+ \frac{B_1x + C_1}{x^2 + bx + c} + \frac{B_2x + C_2}{(x^2 + bx + c)^2} + \cdots + \frac{B_\beta x + C_\beta}{(x^2 + bx + c)^\beta} \quad (203)$$

$$+ \cdots \quad (204)$$

$$\text{mit } A_i, B_i, C_i, a, b, c \in \mathbb{R} \quad (205)$$



Dabei orientiert man sich an der Faktorisierung des Nennerpolynoms  $Q_m(x)$  (nach Gl. 184), die auch die Werte für  $a, b, c$  liefert (mit anderen Worten: die Partialbruchzerlegung ist nur durchführbar, wenn man alle Nullstellen des Nennerpolynoms kennt). Für jede reelle Nullstelle  $x - a = 0$  der Vielfachheit  $\alpha$  sind dabei  $\alpha$  Partialbrüche der ersten Art zu schreiben (Zeile 201). Für jedes konjugiert komplexe Paar von Nullstellen (entsprechend  $x^2 + bx + c = 0$ ) der Vielfachheit  $\beta$  sind  $\beta$  Partialbrüche der zweiten Art zu schreiben (Zeile 203). Die dabei zunächst noch unbekannten Werte für  $A_i, B_i, C_i$  ergeben sich dann folgendermaßen: Man multipliziert Gl. 201 auf beiden Seiten mit dem (vollständig faktorisierten) Nennerpolynom  $Q_m(x)$  und erhält einen Ausdruck dieser Form:

$$P_n(x) = A_1(x-a)^{\alpha-1} \cdots (x^2+bx+c)^\beta \cdots + \cdots + A_\alpha(x^2+bx+c)^\beta \cdots \quad (206)$$

$$+ (B_1x + C_1)(x-a)^\alpha \cdots (x^2+bx+c)^{\beta-1} \cdots + (B_\beta x + C_\beta)(x-a)^\alpha \cdots \quad (207)$$

Ausmultiplizieren der rechten Seite und Ordnen nach Potenzen von  $x$  liefert eine Gleichung, in der auf beiden Seiten mit Koeffizienten versehene Potenzen von  $x$  stehen. Da die Funktionen  $x^n$  für unterschiedliche Werte  $n$  linear unabhängig voneinander sind (man kann sie orthogonalisieren, was zu den Legendre-Polynomen führt, siehe MfC2), müssen die Koeffizienten von  $x^n$  auf der rechten und linken Seite von Gl. 206 gleich sein, und zwar für jeden *einzelnen* Wert  $n$  für sich allein genommen (*Koeffizientenvergleich*). Dadurch erhält man  $m$  Bestimmungsgleichungen für die  $m$  Unbekannten (ein  $A_i$  für jede reelle Nullstelle, ein  $B_i$  und ein  $C_i$  für jedes komplexe Nullstellenpaar). Da die Existenz (und Eindeutigkeit) der Partialbruchzerlegung garantiert ist, ist dieses Gleichungssystem auch tatsächlich lösbar.

### 3.1.5 algebraische Funktionen

Eine algebraische Funktion läßt sich durch einen (nicht notwendigerweise nach  $y$  auflösbaren) analytischen Ausdruck der Form

$$\sum_{i=1}^n P_k^{(i)}(x) \cdot y^i = 0 \quad (208)$$

(streng genommen ist dies eine notwendige, im Rellen aber nicht hinreichende Bedingung). Dabei ist  $P_k(x)$  ein Polynom des Grades  $k$  in der Variable  $x$ . Der hochgestellte Index  $(i)$  soll andeuten, daß jede Potenz  $y^i$  mit einem anderen Polynom multipliziert werden kann. Der Grad dieser algebraischen Funktion ist  $\max(i+k)$ . Wichtig an dieser Definition ist auch, daß die Summe nur endlich viele Terme enthält.

Anders ausgedrückt ist jede Funktion algebraisch, die sich durch endlich viele Anwendungen von Addition, Subtraktion, Multiplikation, Division, Potenzieren und Radizieren aus Konstanten und Potenzen von  $x$  bilden läßt.

Zum Beispiel ist  $y = x^a$  mit  $a \in \mathbb{Q}$  eine rationale Funktion,  $a^x$  mit  $x \in \mathbb{R}$  jedoch im allgemeinen nicht (da Funktionen wie  $e^x$  in der Regel nur durch eine Potenzreihe mit unendlich vielen Termen darstellbar ist, siehe Taylorreihe in Abschnitt 4.4).

Als weitere, illustrative Beispiele und Gegenbeispiele betrachten wir:

$$y = \sqrt{1-x^2} \quad \Rightarrow \quad y^2 + x^2 - 1 = 0 \quad (209)$$

oder allgemeiner

$$y = x^{m/n} = \sqrt[n]{x^m} \quad \Rightarrow \quad y^n - x^m = 0 \quad (210)$$

Beide Funktionen sind irrational (und damit algebraisch); sie wären rational, wenn  $y$  statt  $y^2$  bzw.  $y^n$  auftreten würde. Die Funktion

$$y = |x| = \begin{cases} x & \text{für } x \geq 0 \\ -x & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (211)$$

ist nicht algebraisch, weil sie sich wegen der Betragsbildung und der damit verbundenen Fallunterscheidung nicht in geschlossener („einzeiliger“) Form hinschreiben läßt. Transzendente Funktionen wie

$$y = \sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - + \dots \quad (212)$$

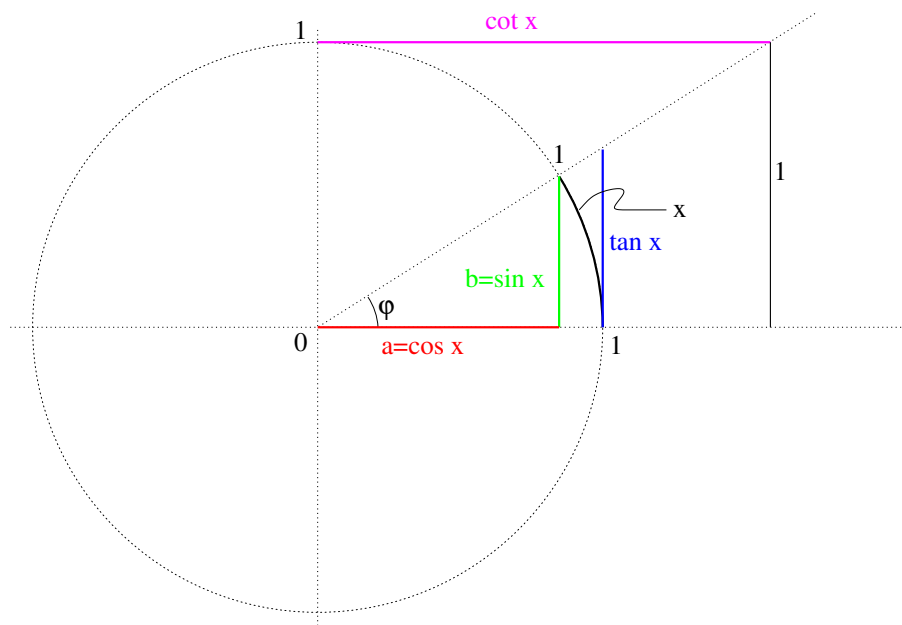
sind nicht algebraisch, da ihre Potenzreihendarstellung (Taylorreihe) unendlich viele Glieder hat.

### 3.1.6 transzendente Funktionen

Funktionen, die nicht algebraisch (also transzendent) sind, sind nicht notwendig auf den ersten Blick exotisch, weder in ihrem Funktionsverlauf noch in ihrer Definition oder ihrer praktischen Bedeutung. Für unsere Zwecke wichtig sind nur einige wenige transzendente Funktionen, die im folgenden vorgestellt werden.

#### Winkelfunktionen und ihre Umkehrfunktionen

Die Winkelfunktionen sind über Streckenverhältnisse am Einheitskreis definiert:



Dabei sind Sinus und Cosinus definiert als:

$$\sin x := \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypothenuse}} = \frac{b}{1} = b \quad (213)$$

$$\cos x := \frac{\text{Ankathete}}{\text{Hypothenuse}} = \frac{a}{1} = a \quad (214)$$

Tangens und Cotangens ergeben sich durch geeignete Anwendung des Strahlensatzes:

$$\tan x = \frac{\tan x}{1} = \frac{b}{a} = \frac{\sin x}{\cos x} \quad (215)$$

$$\cot x = \frac{\cot x}{1} = \frac{a}{b} = \frac{\cos x}{\sin x} \quad (216)$$

Ein voller Umlauf um den Einheitskreis entspricht einem Winkel von  $360^\circ$  bzw. einem Bogenmaß von  $2\pi$ , daher können Winkel  $\varphi$  und Bogenmaß  $x$  mit Hilfe der Beziehung

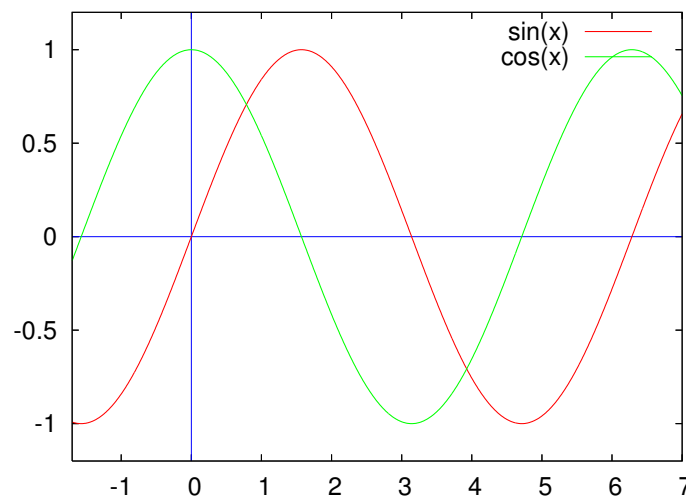
$$\frac{x}{2\pi} = \frac{\varphi}{360^\circ} \quad \text{bzw.} \quad \frac{x}{\pi} = \frac{\varphi}{180^\circ} \quad (217)$$

ineinander umgerechnet werden und gelten als gleichberechtigte Argumente der Winkelfunktionen. Aus demselben Grund sind Sinus und Cosinus periodisch mit einer Periodenlänge von  $2\pi$  und haben einen Wertebereich von  $[-1, +1]$ . Tangens und Cotangens haben eine Periodenlänge von  $\pi$  und einen Wertebereich von  $[-\infty, +\infty]$ . Mit  $k \in \mathbb{Z}$  gilt also:

$$\sin(x) = \sin(x + 2k\pi) \quad , \quad \cos(x) = \cos(x + 2k\pi) \quad (218)$$

$$\tan(x) = \tan(x + k\pi) \quad , \quad \cot(x) = \cot(x + k\pi) \quad (219)$$

Dies sind die Funktionsverläufe von Sinus und Cosinus:



Einige spezielle Werte von Sinus und Cosinus sind:

$\varphi$	$0^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$90^\circ$
$x$	0	$\pi/6$	$\pi/4$	$\pi/3$	$\pi/2$
$\sin x$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}\sqrt{3}$	1
	$\frac{\sqrt{0}}{2}$	$\frac{\sqrt{1}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{4}}{2}$
$\cos x$	1	$\frac{1}{2}\sqrt{3}$	$\frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\frac{1}{2}$	0
	$\frac{\sqrt{4}}{2}$	$\frac{\sqrt{3}}{2}$	$\frac{\sqrt{2}}{2}$	$\frac{\sqrt{1}}{2}$	$\frac{\sqrt{0}}{2}$

(220)

(Die alternativen Schreibweisen in den zweiten Zeilen sind dabei nur als mnemonische

Hilfe gedacht.) Graph und Tabelle lassen einige wichtige Beziehungen errahnen:

$$\sin(\pi - x) = \sin(x) \quad (221)$$

$$\cos(\pi - x) = \cos(-x) \quad (222)$$

$$\sin\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = \cos(x) \quad (223)$$

$$\cos\left(x - \frac{\pi}{2}\right) = \sin(x) \quad (224)$$

$$\sin(-x) = -\sin(x) \quad (225)$$

$$\cos(-x) = \cos(x) \quad (226)$$

Dabei erlauben Beziehungen wie Gln. 221 und 222 die Erweiterung Tabelle Gl. 220 auf andere Argumentbereiche. Die Gln. 223 und 224 zeigen, daß Sinus und Cosinus denselben Funktionsgraphen haben und lediglich gegeneinander um  $\pi/2$  phasenverschoben sind. Die Gln. 225 bzw. 226 zeigen, daß der Sinus eine ungerade und der Cosinus eine gerade Funktion sind (diese zusätzliche Symmetrie erklärt zusammen mit der Periodizität ihren einfachen und ästhetisch ansprechenden Funktionsverlauf).

Die vielleicht wichtigste Beziehung zwischen Sinus und Cosinus ist:

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1 \quad (227)$$

Sie ergibt sich in trivialer Weise aus dem Satz des Pythagoras am Einheitskreis (s. obige Skizze), erlaubt aber später an sehr vielen Stellen eine praktische Umrechnung von Sinus-Ausdrücken in Cosinus-Ausdrücke bzw. umgekehrt.

Zahlreiche sog. Winkeladditionstheoreme

$$\sin(x + y) = \sin x \cos y + \cos x \sin y \quad (228)$$

$$\cos(x + y) = \cos x \cos y - \sin x \sin y \quad (229)$$

$$(230)$$

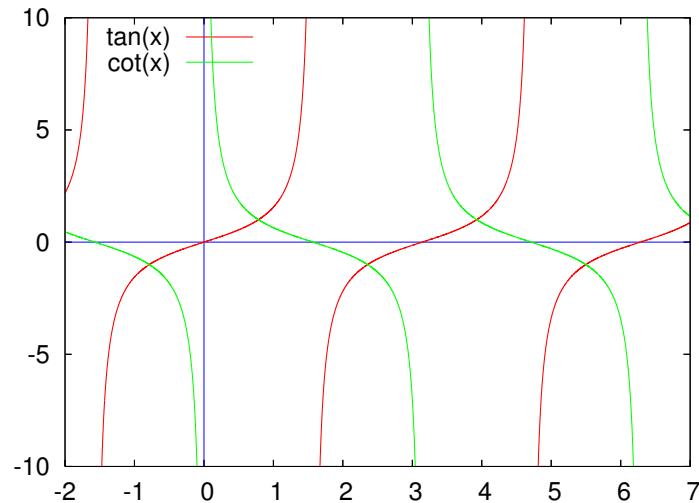
und Halbwinkelsätze

$$\sin(2x) = 2 \sin x \cos x \quad (231)$$

$$\cos(2x) = \cos^2 x - \sin^2 x = 2 \cos^2 x - 1 = 1 - 2 \sin^2 x \quad (232)$$

erlauben weitere Umrechnungen. Diese Sätze sind jedoch mit Hilfe des Zusammenhangs zwischen den Winkelfunktionen und der komplexen Exponentialfunktion  $e^{ix}$  erheblich besser verständlich (s. MfC2).

Dies sind die Funktionsverläufe von Tangens und Cotangens:



Einige spezielle Werte von Tangens und Cotangens sind:

$\varphi$	$0^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$90^\circ$
$x$	0	$\pi/6$	$\pi/4$	$\pi/3$	$\pi/2$
$\tan x$	0	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	1	$\sqrt{3}$	$\pm\infty$
$\cot x$	$\pm\infty$	$\sqrt{3}$	1	$\frac{1}{3}\sqrt{3}$	0

(233)

Per Definition gilt offensichtlich:

$$\tan(x) \cdot \cot(x) = 1 \quad (234)$$

weshalb vielerorts der Cotangens gar nicht als eigenständige Funktion aufgeführt wird. Tangens und Cotangens sind beide(!) ungerade:

$$\tan(-x) = -\tan(x) \quad , \quad \cot(-x) = -\cot(x) \quad (235)$$

Auch für Tangens und Cotangens lassen sich Winkeladditionstheoreme aufstellen:

$$\tan(x+y) = \frac{\tan x + \tan y}{1 - \tan x \tan y} \quad (236)$$

$$\cot(x+y) = \frac{\cot x \cot y - 1}{\cot x + \cot y} \quad (237)$$

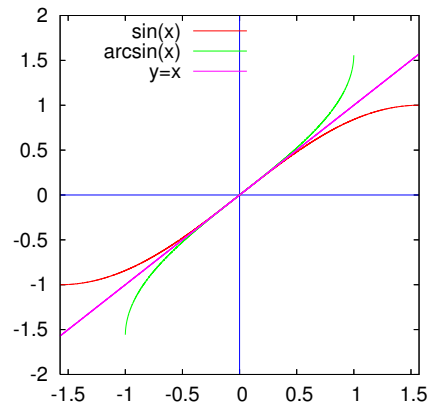
Die *inversen Winkelfunktionen* (auch *zyklometrische Funktionen* genannt) sind ihrerseits auch wieder transzendente Funktionen (tatsächlich gilt dies generell: Umkehrfunktionen transzendenter Funktionen sind ebenfalls transzendente Funktionen). Daher können wir nicht erwarten, diese Funktionen aus bekannten, einfacheren Funktionen im Sinne einer algebraischen Funktion zusammensetzen zu können, sondern müssen sie als neue transzendente Funktionen definieren.

Dabei ist zu beachten, daß alle Winkelfunktionen nur abschnittsweise streng monoton sind, dies aber in zahlreichen, sich wiederholenden Abschnitten. Daher muß eine Vereinbarung getroffen werden, welchen dieser streng monotonen Abschnitte man jeweils invertieren will. Üblicherweise einigt man sich so:

$$y = \sin x \quad \text{streng monoton steigend in } \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right] \Rightarrow \text{Umkehrfunktion: } y = \arcsin x$$

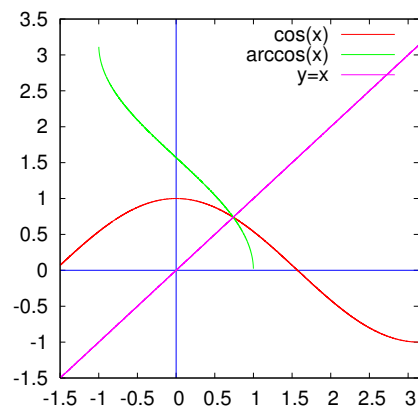
$$y = \cos x \quad \text{streng monoton fallend in } [0, \pi] \Rightarrow \text{Umkehrfunktion: } y = \arccos x$$

Der willkürlich auf das Intervall  $[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}]$  beschränkte Definitionsbereich des Sinus wird zum Wertebereich des Arcus sinus, dessen Definitionsbereich dementsprechend das Intervall  $[-1, +1]$  ist:



Eine gedankliche Fortsetzung der beiden Funktionsgraphen in diesem Bild macht klar, daß eine andere Wahl eines streng monotonen Intervalls an diesem Definitionsbereich nichts ändern würde und lediglich den Wertebereich um positive oder negative Vielfache von  $\pi$  verschieben würde, was dann entsprechend andere Werte als die hier gezeigten Hauptwerte liefern würde.

Analoges gilt für den Arcus cosinus:



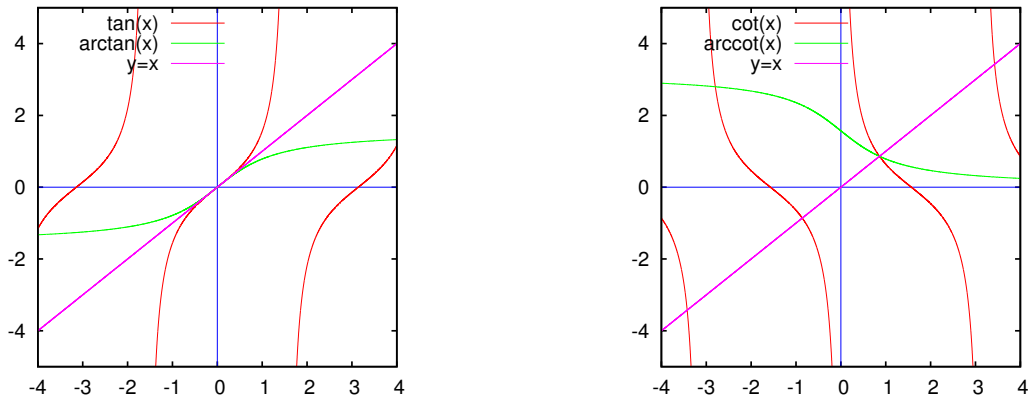
Er hat natürlich denselben Definitionsbereich  $[-1, +1]$  und ist hier mit seinen Hauptwerten im üblichen Wertebereich gezeigt.

Analog wird bei Tangens und Cotangens verfahren. Hier ist die Wahl streng monotoner Abschnitte durch die Polstellen dieser Funktionen quasi bereits vorgegeben. Konventionell wählt man:

$$y = \tan x \quad \text{streng monoton steigend in } ]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[ \Rightarrow \text{Umkehrfunktion: } y = \arctan x$$

$$y = \cot x \quad \text{streng monoton fallend in } ]0, \pi[ \Rightarrow \text{Umkehrfunktion: } y = \operatorname{arccot} x$$

Man erhält damit folgende Funktionsverläufe für den Arcus tangens und den Arcus cotangens:



Wie schon beim Cotangens selbst läßt sich die Existenzberechtigung auch des Arcus cotangens als eigenständige Funktion bezweifeln, da eine enge Beziehung zum Arcus tangens besteht, wie sich leicht zeigen läßt: Ausgehend von

$$y = \arctan(x) \quad (238)$$

erhalten wir durch Anwendung der Umkehrfunktion  $\tan(\cdot)$  auf beiden Seiten:

$$x = \tan(y) = \cot\left(\frac{\pi}{2} - y\right) \quad (239)$$

Im zweiten Schritt wurde dabei folgender Zusammenhang zwischen Tangens und Cotangens verwendet, der aus obigen Funktionsgraphen offensichtlich ist:

$$\tan x = \cot\left(\frac{\pi}{2} - x\right) \quad (240)$$

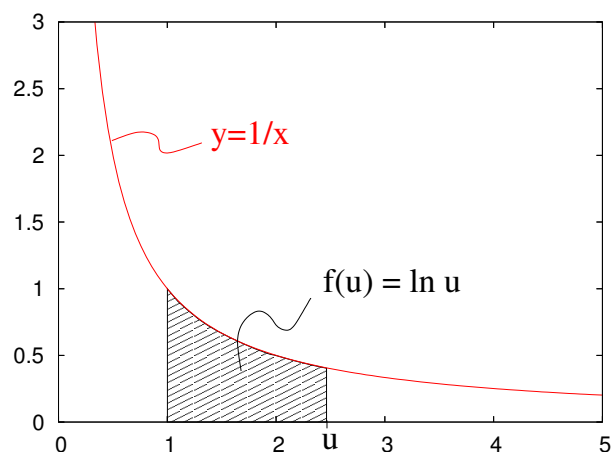
Anwendung des  $\operatorname{arccot}$  auf beiden Seiten von Gl. 239 liefert schließlich den gesuchten direkten Zusammenhang:

$$\operatorname{arccot} x = \left(\frac{\pi}{2} - y\right) = \frac{\pi}{2} - \arctan x \quad (241)$$

## Exponential- und Logarithmusfunktion

Der *natürliche Logarithmus* kann formal eingeführt werden durch das bestimmte Integral (siehe Abschnitt 5.1) der Funktion  $y = 1/x$ :

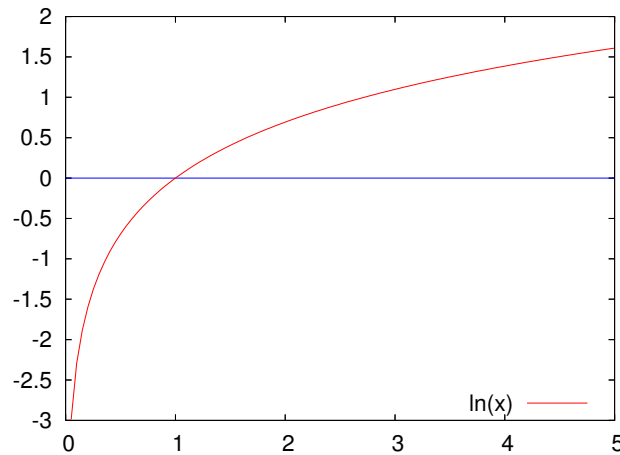
$$\ln u = \int_1^u \frac{dx}{x} \quad (242)$$



Der Definitions- und der Wertebereich von  $\ln x$  sind

$$\mathbb{D} = \{x \in \mathbb{R} | x > 0\} \quad , \quad \mathbb{W} = \mathbb{R} \quad (243)$$

und die Funktion ist überall in ihrem Definitionsbereich streng monoton steigend:



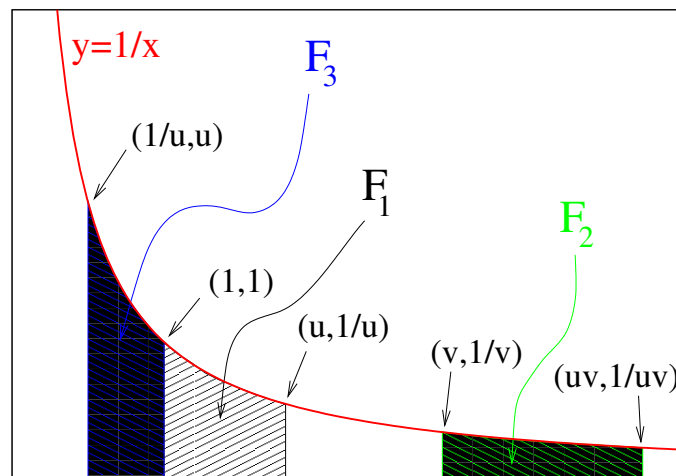
Es gilt

$$\ln 1 = 0 \quad (244)$$

$$\ln x < 0 \quad \text{für} \quad 0 < x < 1 \quad (245)$$

$$\ln x > 0 \quad \text{für} \quad x > 1 \quad (246)$$

Zum Beweis der sogenannten *Haupteigenschaft* des Logarithmus betrachten wir folgende Graphik mit drei Flächeninhalten unter dem Funktionsgraphen von  $y = 1/x$ :



Offenbar gelangen wir von  $F_1$  zu  $F_2$  durch Streckung der  $x$ -Koordinaten um den Faktor  $v$  und Stauchung der  $y$ -Koordinaten um den Faktor  $1/v$ . Da wir zur Berechnung des Flächeninhalts  $x$ - und  $y$ -Koordinaten miteinander multiplizieren müssen (auch bei Flächen mit gekrümmten Rändern, siehe Abschnitt 5.1), bleibt bei dieser Operation der Flächeninhalt gleich:  $F_1 = F_2$ . Also gilt:

$$\boxed{\ln(u \cdot v) = \ln u + \ln v} \quad (247)$$



Analog erfolgt beim Übergang von  $F_1$  zu  $F_3$  eine Stauchung der  $x$ -Koordinaten um den Faktor  $1/u$  und eine Streckung der  $y$ -Koordinaten um den Faktor  $u$ , sodaß auch diese Operation flächentreu ist:  $F_1 = F_3$ . Daraus folgt:

$$\boxed{\ln u = -\ln \frac{1}{u}} \quad (248)$$

(wobei sich das Minuszeichen aus der Vertauschung der Integralunter- und -obergrenzen ergibt, siehe Abschnitt 5.1). In Kombination von Gln. 247 und 248 erhalten wir außerdem:

$$\boxed{\ln \left( \frac{u}{v} \right) = \ln u - \ln v} \quad (249)$$

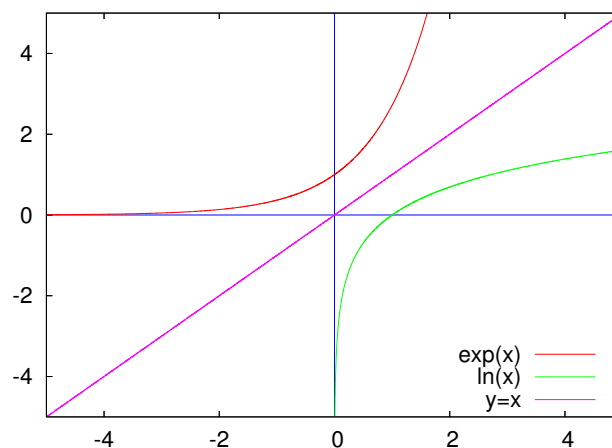
Etwas salopp ausgedrückt wird also unter dem Logarithmus aus einer Multiplikation eine Addition bzw. aus einer Division eine Differenz. Durch wiederholte Anwendung von Gl. 247 ergibt sich schließlich:

$$\begin{aligned} \ln(u^n) &= \ln(u^{n-1} \cdot u) = \ln(u^{n-1}) + \ln u \\ &= \ln(u^{n-2}) + \ln u + \ln u = \ln(u^{n-2}) + 2 \ln u = \dots = n \cdot \ln u \end{aligned} \quad (250)$$

womit wir eine Regel für den Umgang mit Logarithmen von Potenzen erhalten:

$$\boxed{\ln(u^n) = n \cdot \ln u} \quad (251)$$

Da die natürliche Logarithmusfunktion überall streng monoton steigend ist, kann sie als ganzes invertiert werden und liefert als Umkehrfunktion die *Exponentialfunktion* zur Basis  $e$  (wobei  $e$  die Eulersche Zahl ist, mit  $e = \lim_{n \rightarrow \infty} (1 + 1/n)^n \approx 2.7182818\dots$ ):



Wie bei der Bildung der Umkehrfunktion üblich vertauschen sich Definitions- und Wertebereich:

$$\mathbb{D} = \mathbb{R} \quad , \quad \mathbb{W} = \{x \in \mathbb{R} | x > 0\} \quad (252)$$

und natürlich gilt auch hier Gl. 173 (wie für jedes Paar aus Funktion und zugehöriger Umkehrfunktion):

$$\boxed{\ln(e^x) = x} \quad , \quad \boxed{e^{\ln x} = x} \quad (253)$$

Die *Haupteigenschaft* der Exponentialfunktion

$$\boxed{e^a \cdot e^b = e^{a+b}} \quad (254)$$

folgt direkt aus der Haupteigenschaft der Logarithmusfunktion Gl. 247 und der Umkehrfunktionsbeziehung Gl. 253:

$$e^a \cdot e^b = \alpha \cdot \beta = e^{\ln(\alpha \cdot \beta)} = e^{\ln \alpha + \ln \beta} = e^{a+b} \quad (255)$$

wobei folgende Abkürzungen verwendet wurden:

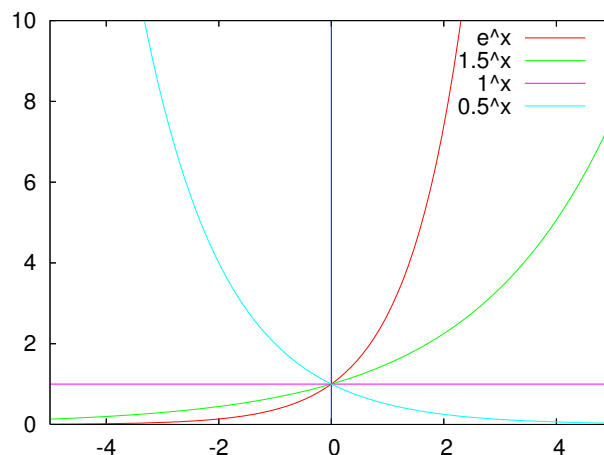
$$\alpha = e^a, \quad \beta = e^b, \quad a = \ln \alpha, \quad b = \ln \beta \quad (256)$$

In ähnlicher Weise läßt sich zeigen:

$$\boxed{\frac{e^a}{e^b} = e^{a-b}} \quad (257)$$

$$\boxed{e^{n \cdot a} = (e^a)^n = (e^n)^a} \quad (258)$$

Die Funktion  $y = e^x = \exp(x)$  ist nur eine spezielle Exponentialfunktion, nämlich die zur Basis  $e$ . Als Basis sind auch beliebige andere Zahlen  $a \in \mathbb{R}$  (mit  $a \neq 0$ ) möglich. Gezeigt sind hier einige Beispiele mit  $a > 0$ :

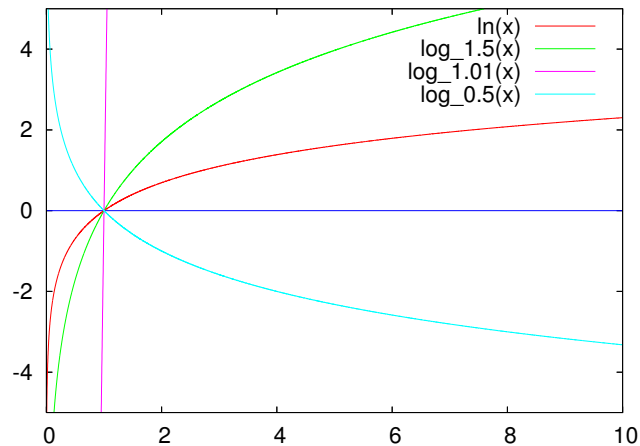


(wobei der Fall  $a = 1$  strenggenommen keine Exponentialfunktion liefert, sondern die konstante Funktion  $y = 1$ ). Exponentialfunktionen mit  $0 < a < 1$  sind streng monoton fallend, solche mit  $a > 1$  streng monoton steigend. Bei  $a < 0$  erhalten wir ein ähnliches Bild, lediglich gespiegelt an der  $y$ -Achse. Eine Umrechnung zwischen diesen Funktionen läßt sich wiederum mit Hilfe der Haupteigenschaften und dem Zusammenhang mit der Logarithmusfunktion erzeugen:

$$\begin{aligned} a^x &= e^{\ln a^x} = e^{x \ln a} = e^{(\ln a) \cdot x} \\ &= (e^{\ln a})^x = (e^x)^{\ln a} \end{aligned}$$

Nötig für die Umrechnung zwischen der Exponentialfunktion zur Basis  $e$  und Exponentialfunktionen zu anderen Basen ist also die Zahl  $\ln a = \log_e a$ .

Analog dazu ist der natürliche Logarithmus nur eine spezielle Logarithmusfunktion, nämlich zur Basis  $e$ . Als Basis sind auch beliebige andere Zahlen  $a \in \mathbb{R}$  (mit  $a > 0$  und  $a \neq 1$ ) möglich, was man dann als  $\log_a(x)$  notiert (also ist  $\ln(x) = \log_e(x)$ ):



Eine Umrechnung zwischen diesen unterschiedlichen Logarithmusfunktionen ergibt sich aus  $x = \exp(\ln x)$  durch Bildung des  $\log_a$  auf beiden Seiten und Anwendung von Gl. 251:

$$\log_a x = \log_a e^{\ln x} = \ln x \cdot \log_a e \quad (259)$$

Nötig für die Umrechnung zwischen dem natürlichen Logarithmus und Logarithmen zu anderen Basen ist also die Zahl  $\log_a e$ . Sie hängt mit der oben verwendeten Zahl  $\ln a = \log_e a$  zur Umrechnung zwischen den Exponentialfunktionen auf einfache Weise zusammen:

$$\log_a e = \frac{1}{\log_e a} = \frac{1}{\ln a} \quad (260)$$

wie sich leicht herleiten läßt:

$$1 = \log_a a = \log_a e^{\ln a} = \ln a \cdot \log_a e \quad (261)$$

Aus der damit umgeschriebenen Gl. 259

$$\log_a x = \frac{\ln x}{\ln a} \quad (262)$$

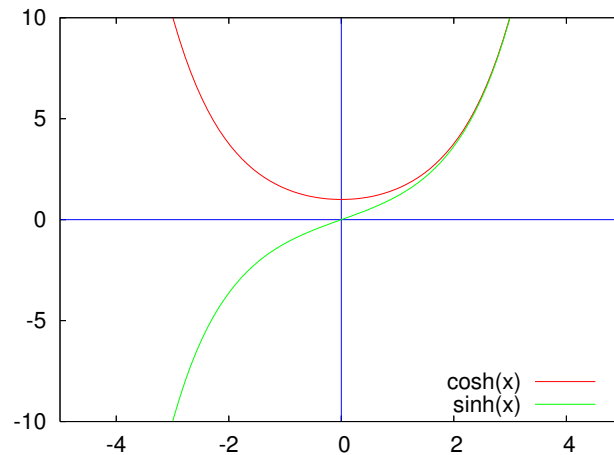
und dem Funktionsverlauf bzw. Definitionsbereich von  $y = \ln x$  wird retrospektiv klar, warum wir weiter oben negative Zahlen  $a$  als Basis für Logarithmen ausschließen mußten und warum  $a = 1$  als Basis auch nicht funktionieren kann (im obigen Graphen wurde stattdessen  $a = 1.01$  verwendet!).

## Hyperbelfunktionen und ihre Umkehrfunktionen

Die Exponentialfunktion  $e^x$  ist weder gerade noch ungerade. Wir können daraus aber nach den Gln. 163 und 164 zwei verwandte Funktionen konstruieren, die sozusagen den geraden und den ungeraden Anteil von  $e^x$  darstellen. Dies sind die Hyperbelfunktionen Sinus hyperbolicus (ungerade) und Cosinus hyperbolicus (gerade):

$$y = \sinh x := \frac{1}{2}(e^x - e^{-x}) \quad (263)$$

$$y = \cosh x := \frac{1}{2}(e^x + e^{-x}) \quad (264)$$



Ähnlich zur Beziehung  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$  bei den Winkelfunktionen (aber nicht ganz genauso!) gilt hier:

$$\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1 \quad (265)$$

Die auf den ersten Blick etwas überraschende Namensgebung dieser Funktionen wird klarer, wenn man mit Hilfe des Eulerschen Satzes  $e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi$  die komplexen Erweiterungen der Sinus- und Cosinusfunktionen konstruiert (für  $x \in \mathbb{C}$ ):

$$\sin x = \frac{1}{2i} (e^{ix} - e^{-ix}) \quad (266)$$

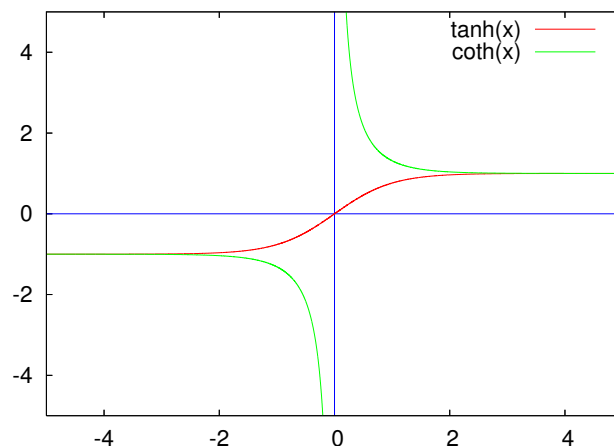
$$\cos x = \frac{1}{2} (e^{ix} + e^{-ix}) \quad (267)$$

Abgesehen vom Auftreten der imaginären Einheit  $i$  im Nenner des  $\sin x$  sind die oben definierten Hyperbelfunktionen nichts anderes als diese komplexen Sinus- bzw. Cosinusfunktionen für rein imaginäre Argumente  $x$  (geben also das Aussehen von Sinus bzw. Cosinus entlang der imaginären Achse wieder).

Entsprechend zu den Winkelfunktionen  $\tan x$  und  $\cot x$  kann man weitere Hyperbelfunktionen konstruieren, den Tangens hyperbolicus und den Cotangens hyperbolicus:

$$y = \tanh x := \frac{\sinh x}{\cosh x} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (268)$$

$$y = \coth x := \frac{\cosh x}{\sinh x} = \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \quad (269)$$



Wie aus ihren Definitionen ersichtlich sind alle vier Hyperbelfunktionen genaugenommen keine eigenständigen, neuen, transzendenten Funktionen, sondern können mit Hilfe der Exponentialfunktion ausgedrückt werden. Daher ist es wenig überraschend, daß die Umkehrfunktionen der Hyperbelfunktionen zwar ebenfalls transzendent sind, aber auch keine neuen Funktionen sind, sondern mit Hilfe des natürlichen Logarithmus dargestellt werden können:

Die Funktion  $y = \sinh x$  ist überall streng monoton (steigend) und kann daher als Ganzes umgekehrt werden. Dies liefert als Umkehrfunktion  $y = \operatorname{arsinh} x$  (Area Sinus Hyperbolicus). Wie angedeutet läßt sich dafür ausnahmsweise ein expliziter Ausdruck in bereits bekannten Funktionen konstruieren, indem wir auf die Definitionsgleichung von  $y = \sinh x$  zurückgreifen, die Variablennamen  $x$  und  $y$  vertauschen und nach  $y$  auflösen. Dabei erhalten wir zunächst:

$$2x = e^y - e^{-y} \quad | \cdot e^y \quad (270)$$

$$2x e^y = e^{2y} - 1 \quad (271)$$

$$e^{2y} - 2x e^y - 1 = 0 \quad (272)$$

Dies ist eine quadratische Gleichung in  $e^y$ , mit den Lösungen:

$$e^{y_{1,2}} = x \pm \sqrt{x^2 + 1} \quad (273)$$

Da der Wertebereich der Exponentialfunktion nur die positiven reellen Zahlen umfaßt, darf hier das negative Vorzeichen vor der Wurzel nicht berücksichtigt werden, also gibt es nur eine gültige Lösung, die wir durch Anwendung des natürlichen Logarithmus auf beiden Seiten erhalten:

$$y = \operatorname{arsinh} x = \ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) \quad (274)$$

Bei der Umkehrung des Cosinus hyperbolicus müssen wir durch geeignete Beschränkung des Definitionsbereichs entweder den linken (streng monoton fallenden) oder rechten (streng monoton steigenden) Ast auswählen und erhalten dann analog zum obigen Vorgehen die folgenden zwei Ausdrücke für den oberen und unteren Ast der Umkehrfunktion:

$$y = \operatorname{arcosh} x = \ln(x - \sqrt{x^2 - 1}) \quad (275)$$

$$= \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) \quad (276)$$

In ähnlicher Weise erhalten wir für die Umkehrfunktion des  $\tanh x$ :

$$y = \operatorname{artanh}(x) = \ln \sqrt{\frac{1+x}{1-x}} = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x} \quad \text{für } |x| < 1 \quad (277)$$

bzw. für die Umkehrfunktion des  $\coth x$ :

$$y = \operatorname{arcoth}(x) = \ln \sqrt{\frac{x+1}{x-1}} = \frac{1}{2} \ln \frac{x+1}{x-1} \quad \text{für } |x| > 1 \quad (278)$$

### 3.1.7 Funktionenklassen

Die folgende Gesamtübersicht zeigt die Einteilung elementarer Funktionen in unterschiedliche Klassen, mit jeweils einem sehr einfachen Beispiel für jede Funktionenklasse:

$$\left. \begin{array}{l} \text{ganz rational, Polynom:} \\ y = f(x) = x \\ \text{gebrochen rational:} \\ y = f(x) = \frac{1}{x} \end{array} \right\} \text{rational} \left\{ \begin{array}{l} \text{algebraisch} \\ \text{irrational:} \\ y = f(x) = \sqrt{x} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{elementar} \\ \text{transzendent:} \\ y = f(x) = \sin x \end{array} \right\} \quad (279)$$

Für jede elementare Funktion läßt sich ein analytischer Ausdruck notieren, z.B. Kombinationen von Summen, Differenzen, Produkten, Quotienten, Exponenten und Wurzeln von algebraischen und transzendenten Funktionen. Für nicht-elementare Funktionen ist kein solcher analytischer Ausdruck möglich; ein pathologisches Beispiel für eine nicht-elementare Funktion ist die Dirichletsche Funktion

$$y = f(x) = \begin{cases} 1 & \text{für } x \in \mathbb{Q} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \quad (280)$$

## 3.2 Parameterdarstellung von Funktionen

Die am häufigsten verwendete Darstellung von Funktionen ist die *explizite*:

$$y = f(x) \quad (281)$$

Die Variablen  $x$  und  $y$  spielen hier keine symmetrischen Rollen, was der üblichen Auffassung entspricht, daß  $x$  die unabhängige und  $y$  die von ihr abhängige Variable ist. Eine evtl. vorliegende Mehrdeutigkeit ist i.d.R. leicht erkennbar. Umgekehrt ist wegen dieser Eindeutigkeit z.B. die Darstellung eines Kreises durch eine einzige explizite Funktion nicht möglich. Allgemeiner gesagt sind Kurven mit Strecken parallel zur  $y$ -Achse nicht darstellbar.

Bereits auf S. 27 wurde auf die *implizite* Darstellung verwiesen:

$$F(x, y) = 0 \quad (282)$$

Sie ermöglichen z.B. die geschlossene Darstellung eines Kreises durch eine einzige Gleichung. Dementsprechend sind Mehrdeutigkeiten evtl. nicht leicht erkennbar. Darüber hinaus sind Koordinaten einzelner Punkte  $(x, y)$  erst durch Lösen einer oft komplizierten Gleichung zu erhalten.

Eine weitere Darstellungsmöglichkeit von Funktionen ist die *Parameterform*:

$$x = x(t) \quad (283)$$

$$y = y(t) \quad (284)$$

Offenbar braucht man dafür eine weitere Variable (hier  $t$ ) und eine weitere Gleichung. Ein manchmal wichtiger Vorteil ist jedoch, daß die Kurve eine "Orientierung" erhält: Wenn der Parameter  $t$  von  $t_1$  nach  $t_2$  (mit  $t_2 > t_1$ ) läuft, durchläuft der Punkt  $P(x(t)|y(t))$  die Kurve in einer bestimmten Richtung (siehe Kurvenintegrale in MfC2). Unter Umständen ist mit Hilfe der Parameterform auch eine leichte Erweiterung von ebenen Kurven auf Raumkurven möglich; dies hatten wir bereits in Abschnitt 2.4.1 für die Geradengleichung mit dem Parameter  $\lambda$  gesehen!). Nachteilig ist, daß es offensichtlich für jede Kurve stets unendliche viele Parameterdarstellungen gibt: Die Substitution  $t = t(\tau)$  führt zur Parameterdarstellung  $x = x(\tau)$ ,  $y = y(\tau)$ . Dies kann jedoch auch ein Vorteil sein, da manche Parameterdarstellungen für bestimmte Zwecke günstiger sein können als andere (siehe Kurvenintegrale in MfC2).

Von einer Parameterform gelangt man durch Elimination des Parameters in die explizite (oder implizite) Form. Um von der expliziten Form zu einer Parameterform zu gelangen, setze man zunächst  $x = x(t)$  mit einer beliebigen Funktion  $x(t)$  (erlaubt ist z.B. auch  $x = t$ ). Einsetzen dieser Beziehung in die explizite Form liefert dann die Vorschrift  $y = y(t)$ .

Dies sei erläutert am Beispiel der (impliziten) Kreisgleichung

$$x^2 + y^2 = r^2 \quad (285)$$

mit einem beliebigen, aber fest vorgegebenen Radius  $r$  (dieses  $r$  ist *kein* Parameter im Sinne dieses Abschnitts!). Wir wünschen uns nun eine beliebige Beziehung zwischen  $x$  und einem neu einzuführenden Parameter  $\varphi$ , zum Beispiel

$$x = r \cos \varphi \quad (286)$$

Einsetzen in Gl. 285 liefert

$$r^2 \cos^2 \varphi + y^2 = r^2 \quad (287)$$

bzw. nach einigen elementaren Umformungen:

$$y^2 = r^2 - r^2 \cos^2 \varphi \quad (288)$$

$$= r^2(1 - \cos^2 \varphi) \quad (289)$$

$$= r^2 \sin^2 \varphi \quad (290)$$

$$y = r \sin \varphi \quad (291)$$

Als Parameterdarstellung der Kreisgleichung haben wir damit folgendes gewonnen:

$$x = r \cos \varphi \quad (292)$$

$$y = r \sin \varphi \quad (293)$$

(Natürlich handelt es sich hier um die üblichen Polarkoordinaten.) Wenn der Parameter  $\varphi$  von 0 bis  $2\pi$  läuft, durchläuft der Punkt  $(x|y)$  die Kreisperipherie ausgehend von der positiven  $x$ -Achse genau einmal im mathematisch positiven Drehsinn (gegen den Uhrzeigersinn). (Hätten wir beim Übergang von Gl. 290 zu Gl. 291 die negative statt der positiven Wurzel gewählt, hätte sich hier der entgegengesetzte Umlaufsinn ergeben.)

Von dieser Darstellung Gln. 292,293 des Kreises mit dem Parameter  $\varphi$  könnten wir zurück zur impliziten Form gelangen, indem wir  $\varphi$  eliminieren, entweder auf elegante Weise durch die Erkenntnis, daß die Bildung von  $x^2 + y^2$  zum gewünschten Ergebnis führt:

$$x^2 + y^2 = r^2(\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) = r^2 \quad (294)$$

oder auf weniger elegante Art, indem zunächst  $\varphi$  durch  $x$  ausgedrückt wird

$$x = r \cos \varphi \quad \Rightarrow \quad \arccos(x/r) = \varphi \quad (295)$$

was dann in die Beziehung Gl. 293 zwischen  $\varphi$  und  $y$  eingesetzt wird:

$$y = r \sin \left( \arccos \frac{x}{r} \right) = r \sqrt{1 - \cos^2 \left( \arccos \frac{x}{r} \right)} = r \sqrt{1 - \left( \frac{x}{r} \right)^2} \quad (296)$$

$$\frac{y^2}{r^2} = 1 - \frac{x^2}{r^2} \quad (297)$$

$$y^2 = r^2 - x^2 \quad (298)$$

Trotz des “schönen” Resultats war die Wahl von Gl. 286 als Zusammenhang zwischen  $x$  und  $\varphi$  völlig willkürlich. Unendlich viele andere Zusammenhänge können gewählt werden und liefern dementsprechend völlig andere Parameterdarstellungen. Als Beispiel probieren wir

$$x = r \frac{2t}{1+t^2} \quad (299)$$

als beliebiger neuer funktionaler Zusammenhang zwischen  $x$  und einem Parameter  $t$ . Die für einen Kreis zugehörige Gleichung für  $y$  lautet

$$y = r \frac{1-t^2}{1+t^2} \quad (300)$$

wie man sich durch Elimination leicht überzeugen kann:

$$x^2 + y^2 = r^2 \left( \frac{4t^2}{(1+t^2)^2} + \frac{1-2t^2+t^4}{(1+t^2)^2} \right) = r^2 \quad (301)$$

Daß sich diese Parameterdarstellung Gln. 299,300 völlig anders verhält als die vorige (Gln. 292,293), wird bereits am völlig anderen Umlaufverhalten klar: Wenn  $t$  von  $-\infty$  bis  $+\infty$  läuft, durchläuft der Punkt  $(x|y)$  den Kreis genau einmal im Uhrzeigersinn, ausgehend von der negativen  $y$ -Achse (wovon man sich mit einer kleinen Wertetabelle schnell überzeugen kann).

Streckt man den Kreis in  $x$ - bzw.  $y$ -Richtung um einen Faktor  $a'$  bzw.  $b'$ , erhält man aus der Parameterdarstellung Gln. 292,293 des Kreises die folgende Parameterdarstellung einer Ellipse:

$$x = r a' \cos \varphi = a \cos \varphi \quad (302)$$

$$y = r b' \sin \varphi = b \sin \varphi \quad (303)$$

Elimination von  $\varphi$  führt auf die bekannte implizite Gleichung der Ellipse:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = \cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi = 1 \quad (304)$$

Die Parameterdarstellung Gln. 292,293 des Kreises läßt sich sehr leicht zur Parameterdarstellung einer Spirale mit Ganghöhe  $2\pi$  erweitern:

$$x = r \cos \varphi \quad (305)$$

$$y = r \sin \varphi \quad (306)$$

$$z = \varphi \quad (307)$$

Im Allgemeinen ergeben *zwei* Gleichungen in *einem* Parameter eine Kurve in der Ebene bzw. *drei* Gleichungen in *einem* Parameter eine Kurve im 3D-Raum. Analog ergeben *drei* Gleichungen in *zwei* Parametern eine Fläche im 3D-Raum (s.o. die Ebenengleichung in Parameterform, Abschnitt 2.4.2, oder die Flächenintegrale in MfC2), etc.



## 4 Differentialrechnung von Funktionen einer Veränderlicher

### 4.1 Der Grenzwertbegriff

#### 4.1.1 Folgen

Zahlenfolgen, Häufungspunkte, Konvergenzkriterien: ♣

#### 4.1.2 Grenzwerte bei Funktionen

Ist die Funktion  $y = f(x)$  in einer hinreichend kleinen Umgebung von  $x = a$  definiert (ggf. mit Ausnahme von  $a$ , d.h.  $f(a)$  muß nicht notwendigerweise bildbar sein und  $f(a) = b$  muß nicht notwendigerweise gelten) und strebt  $f(x)$  für  $x \rightarrow a$  gegen einen konstanten Wert  $b$ , so bezeichnet man  $b$  als Grenzwert der Funktion  $y = f(x)$  an der Stelle  $x = a$ :

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = b \quad (308)$$

Dieser Grenzwert im eigentlichen Sinn existiert aber nur, wenn der rechtsseitige Grenzwert

$$\lim_{x \rightarrow a+} f(x) = b \quad (309)$$

bei dem man nur die rechtsseitige Umgebung  $x \geq a$  betrachtet, und der linksseitige Grenzwert

$$\lim_{x \rightarrow a-} f(x) = b \quad (310)$$

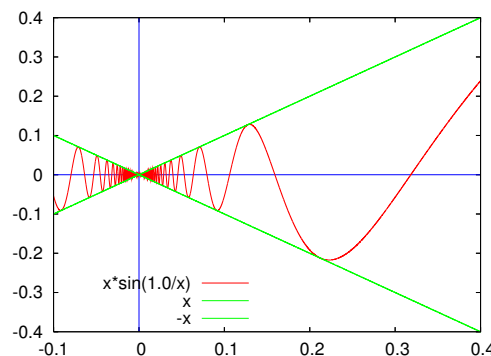
bei dem man nur die linksseitige Umgebung  $x \leq a$  betrachtet, existieren und gleich sind. Diese Zusatzbemerkung erscheint im Reellen unkritisch und etwas spitzfindig, wird aber im Komplexen extrem wichtig und erheblich schwieriger erfüllbar, da in der komplexen Zahlenebene nicht nur zwei sondern unendlich viele Richtungen der Annäherung an einen Punkt existieren.

Das Obige ist nur eine Begriffserläuterung, keine operationale Definition, da das zentrale Objekt (die Annäherung und was dabei passiert) nicht genauer spezifiziert wird. Mathematisch robust ist dagegen folgende Definition:

Die Funktion  $y = f(x)$  sei in einer Umgebung von  $x = a$  definiert (ggf. mit Ausnahme von  $a$ , wie oben). Dann hat  $f(x)$  an der Stelle  $x = a$  den Grenzwert  $b = \lim_{x \rightarrow a} f(x)$ , wenn es zu jedem  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  gibt, sodaß für alle  $x$  mit  $|x - a| < \delta$  gilt:  $|f(x) - b| < \epsilon$ .

Anschaulich bedeutet dies, daß es zu jeder beliebig vorgegebenen  $\epsilon$ -Umgebung von  $b$  (auf der  $y$ -Achse) eine  $\delta$ -Umgebung von  $a$  (auf der  $x$ -Achse) gibt, sodaß alle Punkte der  $\delta$ -Umgebung durch  $f(x)$  in die  $\epsilon$ -Umgebung abgebildet werden. In der Anschauung des Funktionsgraphen paßt also dieser Funktionsgraph in der Nähe von  $x = a$  in ein Rechteck mit Seitenlängen  $\delta$  und  $\epsilon$ ; dabei kann  $\epsilon$  beliebig klein werden, trotzdem gibt es dafür immer einen  $\delta$ -Wert, sodaß der Funktionsgraph vom  $\delta, \epsilon$ -Rechteck komplett eingeschlossen wird. Man beachte, daß dieser Satz den Grenzwert  $b$  verwendet, aber keinerlei Hilfe bietet, diesen Wert  $b$  tatsächlich zu finden; hier ist man auf Raten angewiesen. Erschwerend kommt hinzu, daß jeder einzelne Grenzwert und jede einzelne Funktion erneut getestet werden muß.

*Beispiel:* Wir behaupten:  $\lim_{x \rightarrow 0} x \sin\left(\frac{1}{x}\right) = 0$ , was plausibel erscheint, da  $-1 \leq \sin(1/x) \leq +1$  und diese Amplitude vom Betrag Eins mit  $x$  multipliziert wird, wobei  $x$  aber gegen Null geht:



Diese Behauptung können wir mit der oben angedeuteten  $\epsilon, \delta$ -Argumentation streng beweisen:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \underbrace{|f(x) - 0|}_{< \epsilon} = \lim_{x \rightarrow 0} \left| x \sin\left(\frac{1}{x}\right) \right| = \lim_{x \rightarrow 0} \left\{ |x| \cdot \underbrace{\left| \sin\left(\frac{1}{x}\right) \right|}_{\leq 1} \right\} \leq \lim_{x \rightarrow 0} |x| = \lim_{x \rightarrow 0} \underbrace{|x - 0|}_{< \delta} = 0 \quad (311)$$

Die entscheidende Schlußfolgerung ist, daß sich dabei für  $|f(x) - b|$  und  $|x - b|$  keine von Null verschiedenen Untergrenzen ergeben, sodaß  $\epsilon$  und  $\delta$  tatsächlich beliebig klein gemacht werden können.

Der folgende Satz bringt Funktionsgrenzwerte in Zusammenhang mit Grenzwerten von Zahlenfolgen: Die Funktion  $y = f(x)$  sei in der Umgebung von  $x = a$  definiert (ggf. mit Ausnahme von  $a$ , wie oben). Dann hat  $f(x)$  an der Stelle  $x = a$  den Grenzwert  $b$ , wenn für alle Zahlenfolgen  $x_n$  mit  $x_n \in \mathbb{D}$ ,  $x_n \neq a$  und  $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = a$  gilt:  $\lim_{n \rightarrow \infty} f(x_n) = b$ . Dieser Satz erlaubt zwar die direkte Berechnung des Grenzwerts  $b$ , aber kaum einen Existenzbeweis, da man nie *alle* Zahlenfolgen durchtesten kann. Praktisch brauchbar ist dieser Satz also i.d.R. nur für Nichtexistenzbeweise: Zwei geeignet gewählte Zahlenfolgen führen zu widersprüchlichen Grenzwerten:

*Beispiel:* Zur Ermittlung des Grenzwerts  $\lim_{x \rightarrow 0} \sin\left(\frac{1}{x}\right)$  konstruieren wir zunächst eine Zahlenfolge aus den Nullstellen von  $\sin \alpha$  bei  $\alpha = n \cdot \pi$ , hier also bei

$$\frac{1}{x_n} = n \cdot \pi \quad \Rightarrow \quad x_n = \frac{1}{n\pi} \quad (312)$$

Diese Zahlenwerte  $x_n$  bilden eine Nullfolge:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = 0 \quad (313)$$

laufen also gegen die zu untersuchende Stelle  $x = 0$ . Falls der gesuchte Grenzwert existiert, muß er sich also ergeben, wenn wir diese Zahlen  $x_n$  im Funktionsargument einsetzen:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \sin\left(\frac{1}{x}\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sin\left(\frac{1}{x_n}\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sin(n\pi) = 0 \quad (314)$$

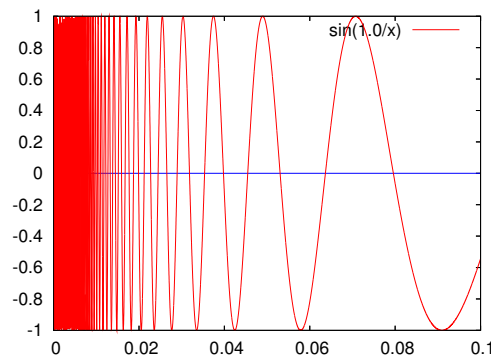
Hier scheint sich also der Grenzwert Null zu ergeben. Tatsächlich hätten wir aber auch eine andere Folge konstruieren können, basierend auf den Maxima von  $\sin \alpha$  bei  $\alpha = (\pi/2) + 2n\pi$ , hier also bei

$$\frac{1}{x_n} = \frac{\pi(1+4n)}{2} \quad \Rightarrow \quad x_n = \frac{2}{\pi(1+4n)} \quad (315)$$

Auch diese Zahlenwerte  $x_n$  bilden eine Nullfolge. Eingesetzt in unsere Funktion erhalten wir:

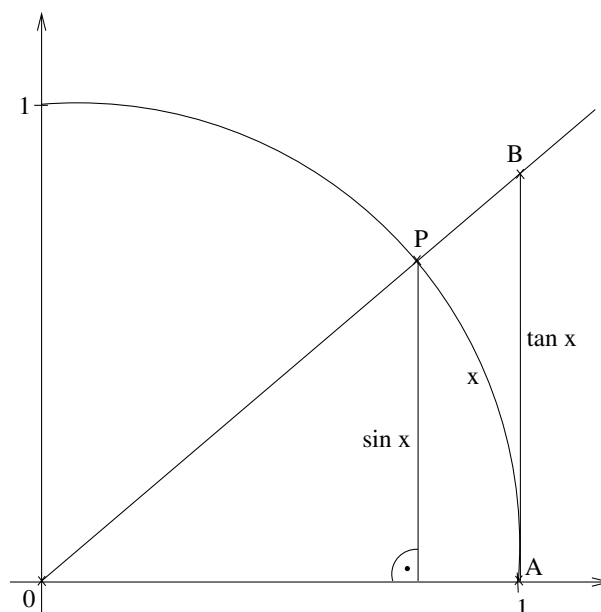
$$\lim_{x \rightarrow 0} \sin\left(\frac{1}{x}\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sin\left(\frac{1}{x_n}\right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sin\left(\frac{\pi}{2} + 2n\pi\right) = 1 \quad (316)$$

Welchen (scheinbaren) Grenzwert wir erhalten, hängt also von der Art der Annäherung ab. Daher existiert dieser Grenzwert *nicht*. Der Grund dafür ist aus dem Funktionsgraphen ersichtlich: Bei  $x \rightarrow 0$  geht die Frequenz dieser Sinusfunktion gegen  $\infty$ , sodaß dort nicht mehr festgestellt werden kann, welchen der Werte ihres Wertebereichs  $[-1, +1]$  sie tatsächlich annimmt:



Natürlich sind darüber hinaus jegliche weitere Argumentationen erlaubt, die die Existenz eines Grenzwerts zeigen oder widerlegen, z.B. geometrische Konstruktionen:

*Beispiel:* Die Behauptung  $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1$  läßt sich wie folgt konstruktiv beweisen: Wir betrachten folgendes Dreieck im Einheitskreis:



Es sei  $F(\triangle OAP)$  der Flächeninhalt des Dreiecks mit den Eckpunkten  $OAP$ ; er ergibt sich nach der Regel „Grundseite mal Höhe“ als die Hälfte des zugehörigen Parallelogramm-Flächeninhalts zu  $\sin(x)/2$ . Weiterhin sei  $F(\cup OAP)$  der Flächeninhalt zwischen denselben drei Eckpunkten, wenn man jedoch die gerade Strecke zwischen  $A$  und  $P$  durch den Kreisrandausschnitt der Bogenlänge  $x$  ersetzt. Die Fläche dieses „Tortenstücks“ verhält sich zur Gesamtkreisfläche (Kreisradius  $r$ ) wie die Bogenlänge zum Gesamtkreisumfang:  $x/(2\pi r)$ . Die Gesamtkreisfläche ist  $\pi r^2$ . Mit  $r = 1$  erhalten wir also:  $F(\cup OAP) = x/2$ . Schließlich sei  $F(\triangle OAB)$  der Flächeninhalt des Dreiecks mit den Eckpunkten  $OAB$ , der laut Zeichnung  $\tan(x)/2$  beträgt. Also gilt:

$$F(\triangle OAP) < F(\cup OAP) < F(\triangle OAB) \quad (317)$$

$$\frac{1}{2} \sin x < \frac{1}{2} x < \frac{1}{2} \tan x \quad (318)$$

Dies muß offenbar auch im Limes  $x \rightarrow 0+$  gelten, wenn wir  $<$  durch  $\leq$  ersetzen (und gleichzeitig können wir mit 2 durchmultiplizieren):

$$\lim_{x \rightarrow 0+} \sin x \leq \lim_{x \rightarrow 0+} x \leq \lim_{x \rightarrow 0+} \tan x \quad (319)$$

Division dieser Ungleichungskette durch  $\sin x$  und Kehrwertbildung liefert:

$$1 \geq \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{\sin x}{x} \geq \lim_{x \rightarrow 0+} \cos x \quad (320)$$

Die Funktion  $y = \cos x$  ist überall stetig, also gilt  $\lim_{x \rightarrow 0+} \cos x = 1$  und wir erhalten:

$$1 \geq \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{\sin x}{x} \geq 1 \quad (321)$$

also muß gelten:

$$\lim_{x \rightarrow 0+} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad (322)$$

Mit der Ersetzung von  $x$  durch  $-x$  erhalten wir außerdem:

$$\lim_{x \rightarrow 0+} \frac{\sin x}{x} = \lim_{x \rightarrow 0-} \frac{\sin(-x)}{-x} = \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{-\sin x}{-x} = \lim_{x \rightarrow 0-} \frac{\sin x}{x} \quad (323)$$

Rechts- und linksseitiger Grenzwert sind also gleich. Damit existiert der gesuchte Grenzwert und hat den Wert 1:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1 \quad (324)$$

Eine andere, vielfach bewährte Strategie zur Ermittlung eines unbekannten Grenzwerts ist die Zurückführung auf einen anderen, bereits bekannten:

*Beispiel:* Der Grenzwert  $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)-1}{x}$  ist zunächst ein unbestimmter Ausdruck „0/0“. Er kann jedoch durch folgende Umformung bestimmt werden:

$$\frac{\cos(x)-1}{x} \frac{\cos(x)+1}{\cos(x)+1} = \frac{\cos^2(x)-1}{x(\cos(x)+1)} = -\frac{\sin^2(x)}{x^2} \frac{x}{\cos(x)+1} \quad (325)$$

Im letzten Ausdruck hat beim Übergang  $x \rightarrow 0$  der erste Faktor den oben gegebenen Grenzwert 1 und der zweite Faktor den Grenzwert 0 (s.u.: Rechnen mit Grenzwerten). Insgesamt ergibt sich daher der Grenzwert Null:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)-1}{x} = 0 \quad (326)$$

In der Praxis wird man zur Bestimmung von Grenzwerten in aller Regel zunächst versuchen, die unten in Abschnitt 4.1.4 gegebenen Regeln für das Rechnen mit Grenzwerten anzuwenden, um den Grenzwert eines gegebenen, komplizierteren funktionalen Ausdrucks auf einfachere Grenzwerte zurückzuführen, was oft bereits die Lösung liefert. Die weiter oben in diesem Abschnitt gegebenen Beispiele sind solche, bei denen diese Regeln versagen, weil kein Grenzwert existiert und/oder unbestimmte Ausdrücke (s.u. Abschnitt 4.1.4) anfallen.

### 4.1.3 Stetigkeit

Eine Funktion  $y = f(x)$  ist in  $x = a$ ,  $a \in \mathbb{D}$ , stetig, wenn  $y = f(a)$  existiert und mit dem Grenzwert von  $y = f(x)$  für  $x \rightarrow a$  übereinstimmt:

$$f(a) = \lim_{x \rightarrow a} f(x) \quad (327)$$

$$= \lim_{x \rightarrow a+} f(x) = \lim_{x \rightarrow a-} f(x) \quad (328)$$

Zeile 328 ist dabei zunächst redundant, da die Existenz des eigentlichen Grenzwerts die Existenz der rechts- und linksseitigen Grenzwerte impliziert, erlaubt aber bei Nichtexistenz des eigentlichen Grenzwerts noch die Definition einer rechts- oder linksseitigen Stetigkeit. Eine Funktion heißt im Intervall  $[a, b]$  stetig, wenn sie für jedes  $x \in [a, b]$  stetig ist. Ist die Funktion an einer Stelle  $x = c$  nicht stetig (unstetig), dann heißt  $c$  Unstetigkeitsstelle.

Beispiele (Un-)Stetigkeit, mit Graphen: ♣

Eine alternative Definition der Stetigkeit lautet: Eine Funktion  $y = f(x)$  heißt an der Stelle  $x = a$  stetig, wenn es zu jedem  $\epsilon > 0$  ein  $\delta > 0$  gibt, sodaß für alle  $x$  mit  $|x - a| < \delta$  gilt:  $|f(x) - f(a)| < \epsilon$ .

Diese Definition ist praktisch identisch zur oben gegebenen Grenzwertdefinition, bis auf das Auftauchen von  $f(a)$  anstelle von  $b$ , d.h. hier muß (im Gegensatz zum Grenzwert)  $f(a)$  tatsächlich existieren.

Wie schon beim Grenzwert ist diese  $\delta, \epsilon$ -Definition für unsere Zwecke weniger interessant als die weiter unten angegebenen (und zum Teil hergeleiteten) Sätze über das Stetigkeitsverhalten ganzer Funktionsklassen und die Regeln zur „Fortpflanzung“ der Stetigkeitseigenschaft bei der Bildung neuer Funktionen (siehe Abschnitt 4.1.4).

Diese Regeln sowie der obige direkte Zusammenhang zwischen Stetigkeit und Grenzwert erlauben es dann in der Praxis, viele Grenzwerte nicht durch komplizierte, spezielle Betrachtungen zu gewinnen, sondern durch Rückführung auf Grenzwerte einfacherer Funktionen und schließlich durch einfache Ersetzung von  $x$  durch  $a$  gemäß Gl. 327. Mit anderen Worten: Bei stetigen Funktionen kann die Bildung des Funktionswerts mit der Grenzwertbildung vertauscht werden:

$$f \text{ stetig in } a \Leftrightarrow \lim_{x \rightarrow a} f(x) = f(a) \Leftrightarrow \lim_{x \rightarrow a} f(x) = f\left(\lim_{x \rightarrow a} x\right) \quad (329)$$

### 4.1.4 Ermittlung von Grenzwerten und Rechnen mit Grenzwerten

Zwei reelle Funktionen  $f(x)$  und  $g(x)$  seien in einem Intervall  $\mathbb{I}$  definiert. Ein reeller Wert  $a$  liege in  $\mathbb{I}$  oder sei ein Randpunkt dieses Intervalls, der nicht notwendigerweise selber noch zu diesem Intervall gehört; dabei ist auch  $a = \pm\infty$  ausdrücklich erlaubt. Die

Grenzwerte von  $f(x)$  und  $g(x)$  für  $x \rightarrow a$  seien endlich oder  $\pm\infty$ . Dann gelten folgende Regeln (analog auch für rechts- bzw. linksseitige Grenzwerte):

$$\lim_{x \rightarrow a} (f(x) \pm g(x)) = \lim_{x \rightarrow a} f(x) \pm \lim_{x \rightarrow a} g(x) \quad (330)$$

wenn dabei nicht  $\infty - \infty$  entsteht.

$$\lim_{x \rightarrow a} (f(x) \cdot g(x)) = \lim_{x \rightarrow a} f(x) \cdot \lim_{x \rightarrow a} g(x) \quad (331)$$

wenn dabei nicht  $0 \cdot \infty$  oder  $\infty \cdot 0$  entsteht.

$$\lim_{x \rightarrow a} (c \cdot f(x)) = c \cdot \lim_{x \rightarrow a} f(x) \quad (332)$$

für  $c \in \mathbb{R}$ ,  $c \neq \pm\infty$

$$\lim_{x \rightarrow a} (f(x)/g(x)) = \lim_{x \rightarrow a} f(x) / \lim_{x \rightarrow a} g(x) \quad (333)$$

wenn dabei nicht  $\infty/\infty$  oder  $0/0$  entsteht.

Nach diesen Regeln können also die Grenzwertbildung und algebraische Rechenoperationen vertauscht werden.

Unabhängig davon sind per Definition ohnehin die Bildung von Funktionswerten mit diesen algebraischen Operationen vertauschbar:

$$(f \pm g)(x) = f(x) \pm g(x), \quad (f \cdot g)(x) = f(x) \cdot g(x), \quad (f/g)(x) = f(x)/g(x) \quad (334)$$

Wenn  $f(x)$  und  $g(x)$  in einem Intervall  $\mathbb{I}$  stetig sind, folgt daher mit Gl. 327 direkt, daß

$$f \pm g, \quad f \cdot g, \quad c \cdot f \text{ für } c \in \mathbb{R}, \quad \text{und } f/g \text{ für alle Stellen } g(x) \neq 0 \text{ in } \mathbb{I} \quad (335)$$

ebenfalls stetige Funktionen in  $\mathbb{I}$  sind. Weiterhin ist jede aus stetigen Funktionen zusammengesetzte Funktion (im Sinne von  $f(x) = v(u(x))$  verschachtelt) eine stetige Funktion.

Zusammen mit den Regeln Gln. 330–333 hat dies weitreichende Folgen: Wenn wir akzeptieren, daß  $y = f(x) = x$  eine stetige Funktion in  $\mathbb{R}$  ist, folgt z.B. mit Gl. 330 und 332 sofort

$$\lim_{x \rightarrow a} f(x) = \lim_{x \rightarrow a} (cx^n) = c \lim_{x \rightarrow a} (x^n) = c \left( \lim_{x \rightarrow a} x \right)^n = ca^n = f(a) \quad (336)$$

Damit ist  $f(x) = cx^n$  ebenfalls in ganz  $\mathbb{R}$  stetig (für beliebige  $c \in \mathbb{R}$  und  $n \in \mathbb{N}$ ). Eine Summe mehrerer Terme dieser Art mit unterschiedlichen Werten für  $c$  und  $n$  ist nach Gl. 330 ebenfalls stetig, also sind beliebige Polynome in ganz  $\mathbb{R}$  stetig. Polynome können zu gebrochen rationalen Funktionen zusammengesetzt werden, die nach Gl. 330 und Gl. 333 dann ebenfalls überall in ihrem Definitionsbereich stetig sind (natürlich mit Ausnahme von Polstellen oder Definitionslücken).

Im Vorgriff auf Abschnitt 4.4 nehmen wir zur Kenntnis, daß zusätzlich alle Funktionen, die in eine Taylorreihe entwickelt werden können, im Konvergenzbereich dieser Reihe stetig sind, also z.B. die Exponentialfunktion und die trigonometrischen Funktionen (da eine Taylorreihe aus polynomialen Summanden besteht, liegt die einzige Schwierigkeit darin, daß die Reihe unendlich viele Terme enthält, daher ist auch die formale Beschränkung dieser Aussage auf das Konvergenzintervall nötig).

Insgesamt ergibt sich also, daß alle Funktionen, die aus Polynomen, rationalen Funktionen, Potenzfunktionen und den üblichen transzendenten Grundfunktionen durch algebraische Operationen und/oder Verschachtelung gebildet werden können, in ihrem Definitionsbereich stetig sind.

Das Auftreten von  $\infty$  sowie unbestimmten Ausdrücken in den Regeln Gl. 330–333 bedarf noch einiger Kommentare. Wenn wir  $b$  als endlichen Grenzwert einer Funktion verstehen und ebenso  $\infty$  als Grenzwert einer Funktion, gelten folgende „Regeln für das Rechnen mit  $\infty$ “:

$$\infty + \infty = \infty \quad (337)$$

$$b \pm \infty = \pm \infty \quad (338)$$

$$\infty \cdot \infty = \infty \quad (339)$$

$$b \cdot \infty = \begin{cases} +\infty, & \text{wenn } b > 0 \\ -\infty, & \text{wenn } b < 0 \end{cases} \quad (340)$$

$$\frac{b}{\infty} = 0 \quad (341)$$

$$\frac{b}{+0} = \begin{cases} +\infty, & \text{wenn } b > 0 \\ -\infty, & \text{wenn } b < 0 \end{cases} \quad (342)$$

$$\frac{b}{-0} = \begin{cases} -\infty, & \text{wenn } b > 0 \\ +\infty, & \text{wenn } b < 0 \end{cases} \quad (343)$$

Bei den Regeln 342 und 343 wurde Null ebenfalls als Grenzwert einer Funktion aufgefaßt,  $\lim_{x \rightarrow a} f(x) = 0$ , und eine genauere Notation für diesen Grenzwert verwendet, nämlich  $+0$ , wenn in einer Umgebung  $(a - \delta, a + \delta)$  von  $x = a$  gilt:  $f(x) > 0$ , bzw. analog  $-0$  für  $f(x) < 0$  (für einseitige Grenzwerte sind analog einseitige Umgebungen zu verwenden).

Diese Regeln 337–343 sind in Kombination mit den Grenzwertrechenregeln 330–333 gültig und regeln die Fälle, in denen die Grenzwertermittlung mit Hilfe dieser Regeln trotz Auftretens potentiell kritischer Ausdrücke wie  $\infty$  oder Division durch Null sinnvoll bleibt.

Davon strikt zu unterscheiden sind die bei den Grenzwertrechenregeln 330–333 bereits mit angegebenen Fälle des Auftretens solcher Ausdrücke, die dann *nicht* sinnvoll weiter behandelt werden können. Es sind dies:

$$\infty - \infty, 0 \cdot \infty, \infty \cdot 0, \frac{0}{0}, \frac{\infty}{\infty} \quad (344)$$

Diese Ausdrücke können je nach ihrem Ursprung völlig unterschiedliche endliche oder unendliche Werte annehmen und heißen deshalb auch *unbestimmte Ausdrücke*.

Treten solche unbestimmten Ausdrücke bei der Ermittlung eines Grenzwerts  $\lim_{x \rightarrow a} f(x)$  nach den Regeln 330–333 auf, kann man diese Regeln nicht anwenden, sondern muß nach anderen Wegen suchen, den Grenzwert zu ermitteln. Einige Möglichkeiten sind

- geeignete Umformung von  $f(x)$  vor der Grenzwertbildung, sodaß danach eine Anwendung der Regeln 330–333 doch wieder möglich ist (bei gebrochen rationalen Funktionen bewährt sich hier die Division von Zähler und Nenner durch die größte Potenz von  $x$ ),
- geeignete Umformung von  $f(x)$  vor der Grenzwertbildung, sodaß danach Ausdrücke mit bereits bekannten Grenzwerten erreicht werden,
- Grenzwertbestimmung mit Hilfe von Zahlenfolgen  $x_n$ ,
- geometrische Konstruktionen,
- Anwendung der Regeln von de L'Hospital.

Einige dieser Möglichkeiten wurden bereits in Abschnitt 4.1.2 erläutert. Die Regeln von de L'Hospital folgen weiter unten in Abschnitt 4.3.

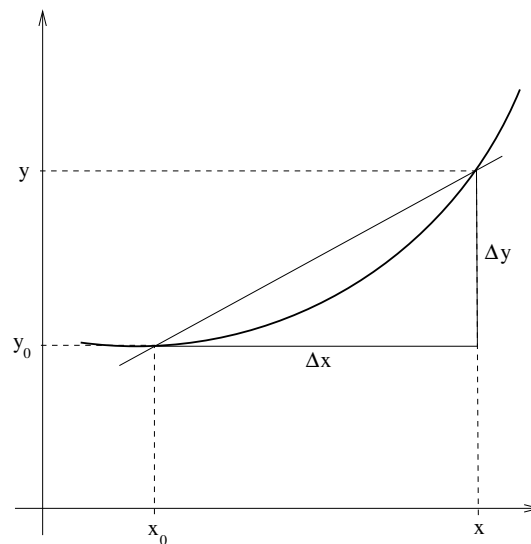
## 4.2 Ableitung von Funktionen

### 4.2.1 Differentialquotient

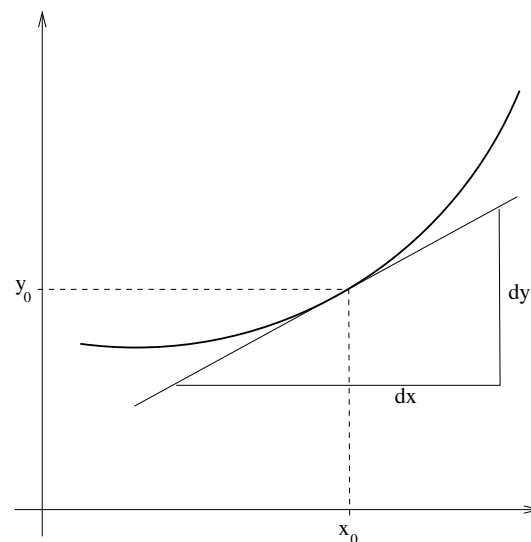
*Definition:* Für die Funktion  $y = f(x)$  und  $x_0 \in \mathbb{D}$  heißt die Funktion

$$\left. \frac{\Delta y}{\Delta x} \right|_{x_0} = \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad (345)$$

Differenzenquotient von  $y = f(x)$  an der Stelle  $x_0$ . Der Differenzenquotient kann geometrisch interpretiert werden als Steigung der Sekante durch die Punkte  $(x_0|f(x_0))$  und  $(x|f(x))$  auf dem Funktionsgraphen:



Beim Grenzübergang  $x \rightarrow x_0$  wird die Sekante zur Tangente an den Funktionsgraphen von  $y = f(x)$  im Punkt  $(x_0|f(x_0))$ ; der Grenzwert der Sekantensteigung ist gleich der Steigung der Tangente in diesem Punkt:





Dieser Grenzübergang ist jedoch nicht immer möglich, da der Limes nicht notwendigerweise existieren muß. Die Funktion  $y = f(x)$  heißt in  $x_0 \in \mathbb{D}$  differenzierbar, wenn für  $x \rightarrow x_0$  der Grenzwert des Differenzenquotienten von  $y = f(x)$  in  $x_0$  existiert. Dieser Grenzwert heißt Differentialquotient oder Ableitung von  $y = f(x)$  an der Stelle  $x = x_0$  und kann verschieden notiert werden:

$$y'|_{x_0} = \left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} = \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} = f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad (346)$$

Ist  $y = f(x)$  an jeder Stelle  $x_0 \in \mathbb{D}$  differenzierbar, so heißt  $y = f(x)$  in  $\mathbb{D}$  differenzierbar. Unabhängig von einer bestimmten Stelle  $x_0$  kann man die Ableitung notieren als:

$$y' = \frac{dy}{dx} = \frac{df(x)}{dx} = f'(x_0) \quad (347)$$

Ist zudem  $y = f'(x)$  in  $x = x_0$  stetig, so heißt  $y = f(x)$  in  $x = x_0$  stetig differenzierbar. Eine weitere, alternative Notationsmöglichkeit ist:

$$y' = \frac{d}{dx} y \quad (348)$$

wodurch ein *Operator*  $d/dx$  eingeführt wird, der auf eine rechts von ihm stehende Funktion wirkt und als Resultat die Ableitungsfunktion erzeugt.

Als praktische Folge der Definition der Ableitung kann die Gleichung einer Tangente an den Funktionsgraphen von  $y = f(x)$  im Punkt  $(x_0 | f(x_0))$  in Punkt-Steigungsform sofort angegeben werden:

$$\frac{y - y_0}{x - x_0} = f'(x_0) \quad (349)$$

Ist eine Funktion  $y = f(x)$  an einer Stelle  $x = x_0$  differenzierbar, so ist sie dort auch stetig, wie leicht gezeigt werden kann: Differenzierbarkeit bedeutet, daß der Limes des Differenzenquotienten eindeutig einer endlichen Zahl entspricht:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} = f'(x_0) \neq \pm\infty \quad (350)$$

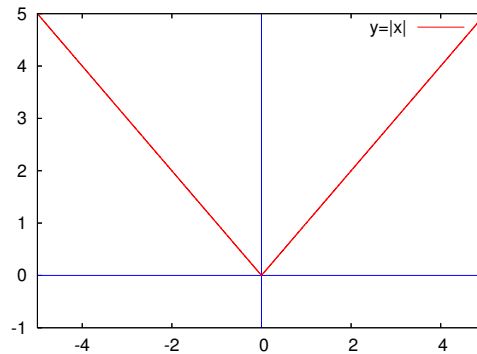
Dieser Ausdruck läßt sich jedoch folgendermaßen umformen:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} (f(x) - f(x_0)) = \underbrace{f'(x_0)}_{\neq \pm\infty} \underbrace{\lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0)}_{=0} = 0 \quad (351)$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} f(x_0) = f(x_0) \quad (352)$$

Gl. 352 ist jedoch nichts anderes als die Stetigkeitsbedingung Gl. 327. Differenzierbarkeit impliziert also Stetigkeit; umgekehrt ist das jedoch nicht der Fall: Stetigkeit ist zwar eine notwendige, aber keine hinreichende Voraussetzung für Differenzierbarkeit.

Als Beispiel dafür betrachten wir die Funktion  $y = f(x) = |x|$ , die für alle  $x \in \mathbb{R}$ , insbesondere inkl.  $x = 0$ , stetig ist:



Sofern der Grenzwert existiert, ist die Ableitung dieser Funktion gegeben durch

$$y' = f'(x) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{|x| - |x_0|}{x - x_0} \quad (353)$$

Alle Werte  $x \neq 0$  erweisen sich als unproblematisch:

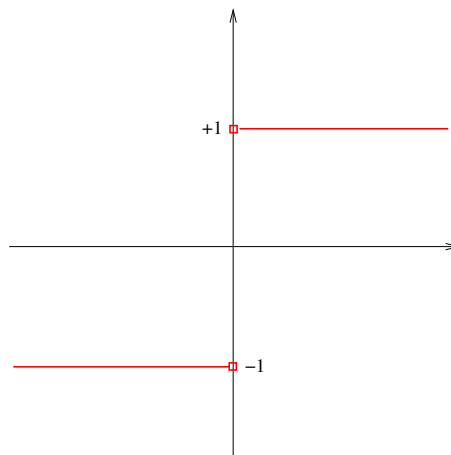
$$y' = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{x - x_0}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} (+1) = +1 \quad \text{für } x_0 > 0 \quad (354)$$

$$y' = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{x_0 - x}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} (-1) = -1 \quad \text{für } x_0 < 0 \quad (355)$$

In beiden Bereichen ist die Funktion also differenzierbar (bzw., da  $y'$  dort stetig ist, sogar stetig differenzierbar). An der Stelle  $x_0 = 0$  existiert jedoch kein einheitlicher (eindeutiger) Grenzwert:

$$y' = \lim_{x \rightarrow 0^\pm} \frac{|x|}{x} = \pm 1 \quad \text{für } x_0 = 0 \quad (356)$$

da rechts- und linksseitiger Grenzwert nicht übereinstimmen:



Die Funktion  $y = |x|$  ist daher an der Stelle  $x = 0$  zwar stetig, aber nicht differenzierbar. Salopp formuliert könnte man sagen, daß sie dort einen „Knick“ hat, was impliziert, daß die 1.Ableitung dort unstetig ist. Diese Diagnosemethode (Differenzierbarkeit anhand der Stetigkeit der Ableitungsfunktion zu untersuchen) ist zwar für unsere Zwecke praxistauglich, aber natürlich nicht ganz unproblematisch, da selbstreferentiell (etwas wird verwendet, um seine eigene Existenz zu belegen oder zu widerlegen).

Die Differenzierbarkeit einer Funktion  $y = f(x)$  ist also im Prinzip durch die Überprüfung zu testen, ob der Grenzwert des Differenzenquotienten existiert (wie oben angegeben und

wie im Beispiel durchgeführt). Wie bereits oben bei Grenzwert und Stetigkeit ergibt sich auch hier das Problem, daß dies für jede einzelne Funktion an jedem einzelnen Punkt neu zu überprüfen wäre. Auch hier werden wir daher anders vorgehen: Wir stellen in Abschnitt 4.2.2 einen Satz von Regeln zusammen, wie Ableitungen komplizierterer Ausdrücke auf Ableitungen einfacherer Ausdrücke zurückführbar sind. In Abschnitt 4.2.3 geben wir einen Katalog von Ableitungen elementarer Funktionen an. Es wird sich dann zeigen, daß wir in Kombination dieser beiden Dinge letztlich Ableitungen von (für unsere Zwecke) fast beliebig komplizierten Funktionen ermitteln können.

Außerdem sollte bereits an dieser Stelle ein weiterer Umstand betont werden: Mit Gl. 346 wurde der Differentialquotient  $dy/dx$  als Limes des Differenzenquotienten  $\Delta y/\Delta x$  eingeführt, für den Grenzübergang  $\Delta x \rightarrow 0$ . Bei Stetigkeit der Funktion  $y = f(x)$  impliziert dieser Übergang aber auch  $\Delta y \rightarrow 0$ , sodaß sich also in jedem Fall für den Differentialquotienten (also die Ableitung) ein unbestimmter Ausdruck der Form „0/0“ ergibt. Daher ist bei der Herleitung von Ausdrücken für Ableitungen elementarer Funktionen (s.u.) besondere Sorgfalt und ggf. etwas Phantasie geboten. Im Erfolgsfall ergibt sich eine Ableitungsfunktion  $f'(x)$ , die diesem unbestimmten Ausdruck „0/0“ einen eindeutigen, i.d.R. finiten Wert verleiht (der sich zudem aber auch i.d.R. in Abhängigkeit von  $x$  verändert). Gleichzeitig ergab sich die Ableitung als Steigung der Tangente an die ursprüngliche Funktion. Im Sinne dieser beiden Tatsachen (Tangentensteigung und Ersatz von „0/0“ durch einen finiten Wert) muß man sich also nicht notwendigerweise die *Differentiale*  $dy$  und  $dx$  als „unendlich kleine“ Ausdrücke vorstellen. Gefordert ist vielmehr nur, daß ihr Quotient einen endlichen Wert hat (den der Tangentensteigung) – in diesem Sinn kann man sich also  $dy$  und  $dx$  auch als beliebig groß (aber endlich) vorstellen.

## 4.2.2 Differentiationsregeln

### Summenregel:

$$\frac{d}{dx}(f(x) + g(x)) = \frac{df(x)}{dx} + \frac{dg(x)}{dx} \quad (357)$$

Beweis durch Verwendung der Ableitungsdefinition und Umordnen:

$$\left. \frac{d}{dx}(f(x) + g(x)) \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{(f(x) + g(x)) - (f(x_0) + g(x_0))}{x - x_0} \quad (358)$$

$$= \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{(f(x) - f(x_0))}{x - x_0} + \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{(g(x) - g(x_0))}{x - x_0} \quad (359)$$

$$=: \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} + \left. \frac{dg(x)}{dx} \right|_{x_0} \quad (360)$$

Zur Konkretisierung der Notation wird hier die Stelle  $x = x_0$  betrachtet. Weil über  $x_0$  keine Annahmen gemacht werden, gilt dies jedoch allgemein.

### Produktregel:

$$\frac{d}{dx}(f(x) \cdot g(x)) = \frac{df(x)}{dx} \cdot g(x) + f(x) \cdot \frac{dg(x)}{dx} \quad (361)$$

Beweis ähnlich zu dem der Summenregel, mit Einfügen einer Null:

$$\left. \frac{d}{dx}(f(x) \cdot g(x)) \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) \cdot g(x) - f(x_0) \cdot g(x_0)}{x - x_0} \quad (362)$$

$$= \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) \cdot g(x) \overset{=0}{- f(x_0) \cdot g(x) + f(x_0) \cdot g(x)} - f(x_0) \cdot g(x_0)}{x - x_0} \quad (363)$$

$$= \lim_{x \rightarrow x_0} \left( \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \cdot g(x) \right) + \lim_{x \rightarrow x_0} \left( f(x_0) \cdot \frac{g(x) - g(x_0)}{x - x_0} \right) \quad (364)$$

$$=: \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} \cdot g(x_0) + f(x_0) \cdot \left. \frac{dg(x)}{dx} \right|_{x_0} \quad (365)$$

**Quotientenregel:**

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f(x)}{g(x)} \right) = \frac{\frac{df(x)}{dx} \cdot g(x) - f(x) \cdot \frac{dg(x)}{dx}}{g(x)^2} \quad (366)$$

Hier ist der Beweis etwas umfangreicher und verwendet neben der Produktregel auch die Kettenregel (s.u.) sowie die Ableitung der Funktion  $y = 1/x$  (s.u.):

$$\frac{d}{dx} \left( \frac{f(x)}{g(x)} \right) = \frac{d}{dx} \left( f(x) \cdot \frac{1}{g(x)} \right) \quad (367)$$

$$= \left( \frac{df(x)}{dx} \cdot \frac{1}{g(x)} + f(x) \cdot \frac{d}{dx} \frac{1}{g(x)} \right) \Big|_{x_0} = \dots \quad (368)$$

Als Nebenrechnung ermitteln wir an dieser Stelle die Ableitung von  $(g(x))^{-1}$ :

$$\frac{d}{dx} \frac{1}{g(x)} = \frac{d}{dg} \left( \frac{1}{g} \right) \cdot \frac{dg(x)}{dx} = -\frac{1}{g(x)^2} \cdot \frac{dg(x)}{dx} \quad (369)$$

und setzen damit die Herleitung fort:

$$\dots = \left( \frac{df(x)}{dx} \cdot \frac{g(x)}{g(x)^2} \right) \Big|_{x_0} - \left( \frac{f(x)}{g(x)^2} \cdot \frac{dg(x)}{dx} \right) \Big|_{x_0} \quad (370)$$

$$= \left( \frac{\frac{df(x)}{dx} \cdot g(x) - f(x) \cdot \frac{dg(x)}{dx}}{g(x)^2} \right) \Big|_{x_0} \quad (371)$$

**Kettenregel:**

Sei  $y = f(u)$  eine unmittelbare Funktion von  $u$ , und  $u = u(x)$  eine unmittelbare Funktion von  $x$ ;  $f[u(x)]$  heißt dann mittelbare Funktion von  $x$ . Wenn  $f(u)$  und  $u(x)$  differenzierbar sind und der Wertebereich von  $u$  im Definitionsbereich von  $f$  enthalten ist, gilt:

$$\frac{d}{dx} f[u(x)] = \frac{df(u)}{du} \cdot \frac{du(x)}{dx} \quad (372)$$

Bei der praktischen Anwendung der Kettenregel liegen im allgemeinen nicht bereits  $f(u)$  und  $u(x)$  als gegeben vor, sondern nur ein komplizierterer funktionaler Ausdruck

$f(x)$ , dessen Ableitung durch Anwendung der Kettenregel vereinfacht oder überhaupt erst ermöglicht werden soll. Dazu muß dann die Funktion  $u(x)$  als geeigneter Teil des Ausdrucks  $f(x)$  definiert werden, sodaß  $f$  dann tatsächlich auch als  $f(u)$  geschrieben werden kann. Die Wahl von  $u(x)$  ist dabei oft offensichtlich; manchmal können sich jedoch mehrere Möglichkeiten zur Auswahl ergeben. Dabei ist zu beachten, daß der Ausdruck  $f(u)$ , der im ersten Faktor  $df(u)/du$  nach  $u$  abgeleitet wird, tatsächlich nur  $u$  (bzw. funktionale Ausdrücke in  $u$ ) enthalten darf, nicht auch  $x$  (bzw. funktionale Ausdrücke in  $x$ ). Wenn letzteres der Fall sein sollte, gilt die Kettenregel in der angegebenen Form *nicht*. Der Ausdruck  $f$  ist dann geeignet umzuformen und/oder eine andere Definition von  $u$  zu wählen, sodaß dieser „Mix“ von  $u$  und  $x$  in  $f(u)$  vermieden wird.

Die Kettenregel setzt voraus, daß der Wertebereich von  $u$  im Definitionsbereich von  $f$  enthalten ist und daß  $u(x)$  und  $f(u)$  differenzierbar ist. Der Beweis der Kettenregel beginnt wieder mit der Definition der Ableitung, gefolgt von einer Multiplikation mit  $1 = (u(x) - u(x_0))/(u(x) - u(x_0))$ :

$$\left. \frac{d}{dx} f[u(x)] \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f[u(x)] - f[u(x_0)]}{x - x_0} \quad (373)$$

$$= \lim_{x \rightarrow x_0} \left( \frac{f[u(x)] - f[u(x_0)]}{u(x) - u(x_0)} \cdot \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0} \right) = \dots \quad (374)$$

An dieser Stelle verwenden wir die Abkürzungen  $u(x_0) = u_0$  sowie  $u(x) = u$  und die Tatsache, daß für  $x \rightarrow x_0$  auch  $u \rightarrow u_0$  gilt (aufgrund der Stetigkeit von  $u(x)$ , die wiederum wegen der Differenzierbarkeit von  $u(x)$  gegeben sein muß). Damit können wir die Herleitung wie folgt fortsetzen:

$$\dots = \lim_{u \rightarrow u_0} \frac{f(u) - f(u_0)}{u - u_0} \cdot \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{u(x) - u(x_0)}{x - x_0} \quad (375)$$

$$=: \left. \frac{df(u)}{du} \right|_{u_0} \cdot \left. \frac{du(x)}{dx} \right|_{x_0} \quad (376)$$

### Ableitung der Umkehrfunktion:

In manchen Fällen ist es vorteilhaft, nicht die gegebene Funktion

$$y = f(x) \quad , \quad x \xrightarrow{f} y \quad (377)$$

abzuleiten, sondern ihre Umkehrfunktion

$$x = f^{-1}(y) \quad , \quad x \xleftarrow{f^{-1}} y \quad (378)$$

(hier notiert ohne Vertauschung der Variablennamen  $x$  und  $y$ ). Wie leicht gezeigt werden kann, hängen diese beiden Ableitungen eng zusammen:

$$f'(x_0) = \left. \frac{df(x)}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{y - y_0}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{1}{\frac{x - x_0}{y - y_0}} = \dots \quad (379)$$

Differenzierbarkeit von  $f(x)$  impliziert Stetigkeit, und bei Stetigkeit von  $f(x)$  gilt  $y \rightarrow y_0$  bei  $x \rightarrow x_0$ . Daher können wir an dieser Stelle als Fortsetzung der in Gl. 379 begonnenen

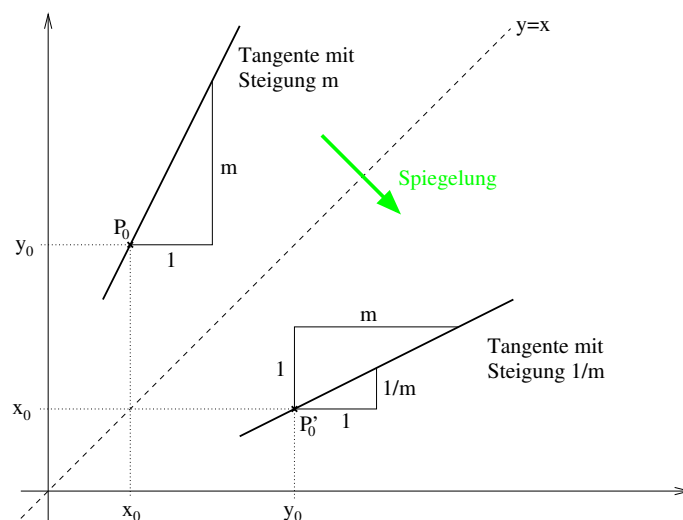
Argumentation den Limes genauso gut auch für  $y \rightarrow y_0$  formulieren:

$$f'(x_0) = \dots = \lim_{y \rightarrow y_0} \frac{1}{\frac{x - x_0}{y - y_0}} = \frac{1}{\left. \frac{df^{-1}(y)}{dy} \right|_{y_0}} = \frac{1}{f^{-1'}(y_0)} \quad (380)$$

Die Ableitung der ursprünglichen Funktion  $y = f(x)$  an der Stelle  $x = x_0$  erweist sich also als identisch zum Kehrwert der Ableitung der Umkehrfunktion  $x = f^{-1}(y)$  an der Stelle  $y = y_0$ .

Derselbe Umstand ist in graphischer Veranschaulichung fast schon trivial: Der Graph der Umkehrfunktion entsteht aus Spiegelung des Graphen der ursprünglichen Funktion an der 1. Winkelhalbierenden. Die Steigung der Tangente an die ursprüngliche Funktion im Punkt  $P_0(x_0, y_0)$ , die durch  $m = f'(x_0)$  gegeben ist, muß zwangsläufig der Kehrwert der Steigung der an der 1. Winkelhalbierenden gespiegelten Geraden sein (Strahlensatz), die eine Tangente an die Umkehrfunktion im gespiegelten Punkt  $P'_0(y_0, x_0)$  sein muß:

$$\frac{1}{f'(x_0)} = \frac{1}{m} = f^{-1'}(y_0) \quad (381)$$



#### 4.2.3 Ableitung elementarer Funktionen

Die Ableitungen einiger sehr einfacher Funktionen lassen sich ohne großen Aufwand direkt dadurch konstruieren, daß wir zunächst die grundlegende Definition Gl. 346 für die Ableitung heranziehen und anschließend den dabei auftretenden Grenzwert bestimmen (wobei, wie angekündigt, Vorsicht geboten ist, weil per Konstruktion immer zunächst ein unbestimmter Ausdruck vorliegt).

- *Ableitung einer Konstante:*

$$y = c \quad , \quad \frac{dy}{dx} = 0 \quad (382)$$

Zum Beweis verwenden wir nach der Ableitungsdefinition, daß der Zähler bereits Null ist, *bevor* der Limes angewendet wird:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{c - c}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{0}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} 0 = 0 \quad (383)$$

- *Ableitung von  $y = x$ :*

$$y = x \quad , \quad \frac{dy}{dx} = 1 \quad (384)$$

Beim Beweis können wir *vor* der Anwendung des Limes kürzen:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{x - x_0}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} 1 = 1 \quad (385)$$

- *Ableitung von  $1/x$ :*

$$y = \frac{1}{x} \quad , \quad \frac{dy}{dx} = -\frac{1}{x^2} \quad (386)$$

Ähnlich wie beim vorigen Beweis können wir auch hier kürzen, unter Berücksichtigung von  $(x_0 - x) = -(x - x_0)$ :

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\frac{1}{x} - \frac{1}{x_0}}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\frac{x_0 - x}{xx_0}}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{-1}{xx_0} = -\frac{1}{x_0^2} \quad (387)$$

Mit Hilfe der obigen drei Grundableitungen und den Ableitungsregeln aus Abschnitt 4.2.2 sind wir nun in der Lage, einige weitere Ableitungen zu konstruieren, ohne jedesmal erneut einen Beweis über die Definition der Ableitung und die explizite Bestimmung eines Grenzwerts zu führen:

- *Ableitung von  $x^n$ :*

$$y = x^n \quad , \quad \frac{dy}{dx} = n \cdot x^{n-1} \quad \text{für } n \in \mathbb{N} \quad (388)$$

Der Beweis beruht auf einer  $n$ -maligen Anwendung der Produktregel sowie der Ableitung von  $y = x$  (Gl. 384), wodurch sich die verbleibende Ableitung auf diejenige einer Konstanten (Gl. 382) reduziert:

$$\frac{d}{dx}(x^n) = \frac{d}{dx}(x \cdot x^{n-1}) \quad (389)$$

$$= x^{n-1} + x \cdot \frac{d}{dx}(x \cdot x^{n-2}) = x^{n-1} + x \cdot x^{n-2} \cdot \frac{dx}{dx} + x^2 \cdot \frac{d}{dx}(x^{n-2}) \quad (390)$$

$$= x^{n-1} + x^{n-1} + x^2 \cdot \frac{d}{dx}(x^{n-2}) \quad (391)$$

$$= \dots \dots \dots \quad (392)$$

$$= \underbrace{x^{n-1} + x^{n-1} + \dots + x^{n-1}}_{n \text{ mal}} + \underbrace{x^n \cdot \frac{d}{dx}(x^{n-n})}_0 \quad (393)$$

$$= n \cdot x^{n-1} \quad (394)$$

- *Ableitung von  $x^{-n}$ :*

$$y = x^{-n} \quad , \quad \frac{dy}{dx} = -n \cdot x^{-n-1} \quad \text{für } n \in \mathbb{N} \quad (395)$$

Mit Hilfe der alternativen Schreibweise  $x^{-n} = (x^{-1})^n$ , der Kettenregel und Gl. 386 für die innere Ableitung läßt sich dies leicht beweisen:

$$\frac{d}{dx}[(x^{-1})^n] = n(x^{-1})^{n-1} \cdot \frac{-1}{x^2} = -nx^{-n+1} \cdot x^{-2} = -nx^{-n-1} \quad (396)$$

Die letzten beiden Ableitungen sind von gleicher Form und können zusammengefaßt werden:

$$y = x^a \quad , \quad \frac{dy}{dx} = a \cdot x^{a-1} \quad \text{für } a \in \mathbb{Z}/\{0\} \quad (397)$$

Kombination der bis hierher angegebenen Ableitungen elementarer Funktionen mit den obigen Ableitungsregeln erlaubt bereits die Ableitung aller rationalen Funktionen.

Tatsächlich kann aber Gl. 397 auch auf  $a \in \mathbb{Q}$  erweitert werden. Dazu verwenden wir die Regel zum Ableiten der Umkehrfunktion Gl. 379, 380 und ermitteln die Ableitung von  $y = x^{1/n}$  für  $n \in \mathbb{N}$  über den Kehrwert der Ableitung der Umkehrfunktion  $x = y^n$ , die ihrerseits bereits durch Gl. 388 gegeben war:

$$\frac{d}{dx}(x^{1/n}) = \frac{dy}{dx} = \frac{1}{\frac{d}{dy}y^n} = \frac{1}{ny^{n-1}} = \frac{1}{n}y^{1-n} = \frac{1}{n}x^{(1-n)/n} = \frac{1}{n}x^{\frac{1}{n}-1} \quad (398)$$

Damit gilt für alle rationalen Potenzen von  $x$  die gleiche Regel wie für ganzzahlige:

$$y = x^{\frac{m}{n}} \quad , \quad y' = \frac{m}{n}x^{\frac{m}{n}-1} \quad , \quad m, n \in \mathbb{Z} \quad (399)$$

womit alle algebraischen Funktionen ableitbar werden.

Da alle reellen Zahlen beliebig eng zwischen zwei rationalen Zahlen eingegrenzt werden können, akzeptieren wir ohne weiteren Beweis, daß wir diese Ableitungsregel auch auf reelle Exponenten erweitern können:

$$y = x^\alpha \quad , \quad y' = \alpha x^{\alpha-1} \quad , \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad (400)$$

Jede transzendente Funktion hat im allgemeinen ihre eigene Definition; bestenfalls sind Zusammenhänge mit anderen transzendenten Funktionen ausnutzbar. Insbesondere können transzendente Funktionen per definitionem nicht durch algebraische oder rationale Funktionen oder (endliche) Kombinationen davon ausgedrückt werden. Daher ist für jede einzelne transzendente Funktion die Ableitung gesondert zu ermitteln (also wieder über die Definition der Ableitung und die Grenzwertbetrachtung des resultierenden unbestimmten Ausdrucks), was hier für einige grundlegende transzendente Funktionen gezeigt wird:

• *Ableitung des Sinus:*

$$y = \sin x \quad , \quad \frac{dy}{dx} = \cos x \quad (401)$$

Beim Beweis verwenden wir zunächst die Definition  $\Delta x = x - x_0$  und anschließend das Winkeladditionstheorem Gl. 228:

$$\left. \frac{d}{dx} \right|_{x_0} := \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\sin x - \sin x_0}{x - x_0} \quad (402)$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin(x_0 + \Delta x) - \sin x_0}{\Delta x} \quad (403)$$

$$= \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin x_0 \cos \Delta x + \cos x_0 \sin \Delta x - \sin x_0}{\Delta x} = \dots \quad (404)$$

Der resultierende Ausdruck kann unter Berücksichtigung der Regeln fürs Rechnen mit Grenzwerten Gln. 330 und 332 in einfacher Weise in zwei Summanden aufgespalten werden, deren Grenzwerte bereits in Abschnitt 4.1.2 ermittelt wurden:

$$\dots = \sin x_0 \underbrace{\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\cos \Delta x - 1}{\Delta x}}_{=0} + \cos x_0 \underbrace{\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\sin \Delta x}{\Delta x}}_{=1} = \cos x_0 \quad (405)$$



- *Ableitung des Cosinus:*

$$y = \cos x \quad , \quad \frac{dy}{dx} = -\sin x \quad (406)$$

Mit etwas Raffinesse ist es möglich, dies auf die obige Ableitung des Sinus zurückzuführen. Dazu verwenden wir zunächst Gl. 227 und anschließend die Kettenregel:

$$\frac{d}{dx} \cos x = \frac{d}{dx} (1 - \sin^2 x)^{1/2} = \frac{1}{2} \underbrace{(1 - \sin^2 x)^{-1/2}}_{\underbrace{\cos^2 x}_{\frac{1}{\cos x}}} \cdot (-2 \sin x \cdot \cos x) = -\sin x \quad (407)$$

Da  $\tan x$  und  $\cot x$  als Quotienten von  $\sin x$  und  $\cos x$  definiert sind, ergeben sich ihre Ableitungen durch Kombination der Quotientenregel mit den oben angegebenen Ableitungen von  $\sin x$  und  $\cos x$ :

$$y = \tan x = \frac{\sin x}{\cos x} \quad , \quad \frac{dy}{dx} = \frac{\cos x \cos x - \sin x(-\sin x)}{\cos^2 x} = \frac{1}{\cos^2 x} \quad (408)$$

$$y = \cot x = \frac{\cos x}{\sin x} \quad , \quad \frac{dy}{dx} = \frac{-\sin x \sin x - \cos x \cos x}{\sin^2 x} = -\frac{1}{\sin^2 x} \quad (409)$$

wobei in beiden Fällen die Beziehung  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$  verwendet wurde.

- *Ableitung des natürlichen Logarithmus:*

$$y = \ln x \quad , \quad \frac{dy}{dx} = \frac{1}{x} \quad (410)$$

Hier müssen wir wieder auf die Grunddefinition der Ableitung zurückfallen:

$$\left. \frac{d(\ln x)}{dx} \right|_{x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{\ln x - \ln x_0}{x - x_0} \quad (411)$$

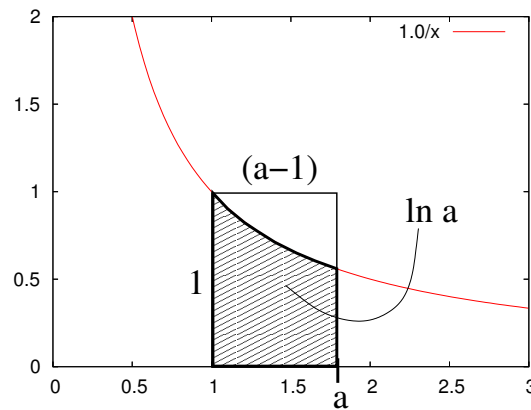
$$= \lim_{a \rightarrow 1} \frac{\ln(ax_0) - \ln(x_0)}{ax_0 - x_0} = \dots \quad (412)$$

wobei wir im letzten Schritt die Annäherung von  $x$  an  $x_0$  mit Hilfe der Setzung  $x = ax_0$  umformuliert haben auf  $a \rightarrow 1$  (was legitim ist, sofern der Grenzwert existiert, weil er dann unabhängig von der Art der Annäherung sein muß). Jetzt können wir  $1/x_0$  ausklammern und die Haupteigenschaft des Logarithmus Gl. 247 für  $\ln(ax_0) = \ln a + \ln x_0$  verwenden und erhalten:

$$\dots = \frac{1}{x_0} \lim_{a \rightarrow 1} \frac{\ln a + \ln x_0 - \ln x_0}{a - 1} \quad (413)$$

$$= \frac{1}{x_0} \lim_{a \rightarrow 1} \underbrace{\frac{\ln a}{a - 1}}_{=1} = \frac{1}{x_0} \quad (414)$$

Im letzten Schritt stehen wir eigentlich immer noch bei der Berechnung eines unbestimmten Ausdrucks vom Typ „0/0“ mit Hilfe eines Grenzwerts, haben also scheinbar gegenüber der Ausgangssituation gar nichts gewonnen. Diesen Grenzwert können wir jedoch mit einer Argumentation bestimmen, die durch folgende Skizze veranschaulicht werden kann:



Wir greifen dabei wieder auf die Definition des natürlichen Logarithmus als Fläche unter dem Funktionsgraphen von  $y = 1/x$  zurück und können demgemäß die durch den Ausdruck „ $\ln a$ “ repräsentierte Fläche (mit gekrümmter Oberkante) wie eingezeichnet durch eine Rechtecksfläche approximieren. Im Limes  $a \rightarrow 1$  wird diese Approximation exakt:

$$\lim_{a \rightarrow 1} \ln a = \lim_{a \rightarrow 1} ((a - 1) \cdot 1) \quad (415)$$

Daß dieser Grenzwert sowohl auf der rechten Seite dieser Gleichung als auch auf der linken (wegen der Stetigkeit der Logarithmusfunktion im Punkt  $x = a$ ) Null ist, ist hier nicht von Belang, da wir diesen Grenzwert im Moment noch gar nicht bilden wollen. Stattdessen dividieren wir links und rechts durch  $\lim(a - 1)$  und erhalten so den oben bereits verwendeten, anderen Grenzwert:

$$\lim_{a \rightarrow 1} \frac{\ln a}{a - 1} = 1 \quad (416)$$

Einige weitere transzendente Funktionen sind Umkehrfunktionen derjenigen, die oben bereits abgeleitet wurden. Hier kann daher wieder die Regel zum Ableiten von Umkehrfunktionen Gl. 379,380 verwendet werden:

$$y = \arcsin x \quad , \quad \text{Umkehrfunktion: } x = \sin y \quad (417)$$

$$\frac{d}{dx} \arcsin x = \frac{1}{\frac{d}{dy} \sin y} = \frac{1}{\cos y} = \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2 y}} = \frac{1}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (418)$$

wobei die Beziehung  $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$  verwendet wurde. Dabei ist zu beachten, daß der Wertebereich von  $\sin x$  bzw. der Definitionsbereich von  $\arcsin x$  auf  $[-1, +1]$  beschränkt ist, sodaß der Radikand immer positiv bleibt. Weiterhin ist wegen der standardmäßigen Beschränkung des Wertebereichs von  $\arcsin x$  auf  $[-\frac{\pi}{2}, +\frac{\pi}{2}]$  (bzw. Beschränkung des Definitionsbereichs von  $\sin x$  auf diesen streng monotonen Bereich vor Bildung der Umkehrfunktion) beim Übergang von  $\cos y$  zu  $\sqrt{1 - \sin^2 y}$  nur die positive Wurzel relevant (sonst hätte es auch die negative sein können).

Analog ergibt sich:

$$y = \arccos x \quad , \quad \text{Umkehrfunktion: } x = \cos y \quad (419)$$

$$\frac{d}{dx} \arccos x = \frac{1}{\frac{d}{dy} \cos y} = \frac{-1}{\sin y} = \frac{-1}{\sqrt{1 - \cos^2 y}} = \frac{-1}{\sqrt{1 - x^2}} \quad (420)$$

In ähnlicher Weise ergibt sich aus den bereits bekannten Ableitungen von  $\tan x$  und  $\cot x$  (Gln. 408, 409):

$$y = \arctan x \quad , \quad \text{Umkehrfunktion: } x = \tan y \quad (421)$$

$$\frac{d}{dx} \arctan x = \frac{1}{\frac{d}{dy} \tan y} = \frac{1}{\cos^2 y} = \frac{1}{\cos^2 y + \sin^2 y} = \frac{1}{1 + \tan^2 y} = \frac{1}{1 + x^2} \quad (422)$$

$$y = \operatorname{arccot} x \quad , \quad \text{Umkehrfunktion: } x = \cot y \quad (423)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{arccot} x = \frac{1}{\frac{d}{dy} \cot y} = \frac{1}{\frac{-1}{\sin^2 y}} = \frac{-1}{\frac{\cos^2 y + \sin^2 y}{\cos^2 y}} = \frac{-1}{1 + \cot^2 y} = \frac{-1}{1 + x^2} \quad (424)$$

Im Vorgriff auf Kapitel 5 sollte bereits an dieser Stelle darauf hingewiesen werden, daß jede Ableitungsregel bei ihrer „Umkehrung“ eine Integrationsregel liefert. Dementsprechend ist das Integral von  $1/(1+x^2)$ , das trotz seines einfachen Aussehens mit elementaren Methoden nicht konstruierbar ist, dennoch ein einfaches Grundintegral, das (in „Umkehrung“ von Gl. 422) als Resultat den  $\arctan x$  liefert, was gerne vergessen wird.

Die Ableitung der Exponentialfunktion ergibt sich analog aus der schon bekannten Ableitung der Logarithmusfunktion Gl. 410:

$$y = e^x \quad , \quad \text{Umkehrfunktion: } x = \ln y \quad (425)$$

$$\frac{d}{dx} e^x = \frac{1}{\frac{d}{dy} \ln y} = \frac{1}{\frac{1}{y}} = y = e^x \quad (426)$$

Die Ableitungen der Hyperbelfunktionen ergeben sich in einfacher Weise aus ihrem Definitionszusammenhang mit der Exponentialfunktion (Gln. 263, 264, 268, 269):

$$\frac{d}{dx} \sinh(x) = \cosh(x) \quad (427)$$

$$\frac{d}{dx} \cosh(x) = \sinh(x) \quad (428)$$

$$\frac{d}{dx} \tanh(x) = \frac{1}{\cosh^2(x)} \quad (429)$$

$$\frac{d}{dx} \coth(x) = \frac{-1}{\sinh^2(x)} \quad (430)$$

In ähnlicher Weise lassen sich die Ableitungen der Areafunktionen (Umkehrfunktionen der Hyperbelfunktionen) leicht aus ihren alternativen Schreibweisen Gln. 274, 275, 277, 278 gewinnen:

$$\frac{d}{dx} \operatorname{arsinh}(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + 1}} \quad (431)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{arcosh}(x) = \frac{1}{\sqrt{x^2 - 1}} \quad (432)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{artanh}(x) = \frac{1}{1 - x^2} \quad (433)$$

$$\frac{d}{dx} \operatorname{arcoth}(x) = \frac{1}{1 - x^2} \quad (434)$$

Viele Ableitungen elementarer Funktionen (z.B. Gl. 384, 386, 401, 422, usw.) scheinen der Regel zu gehorchen, daß die Ableitung einer geraden Funktion ungerade ist bzw. die Ableitung einer ungeraden Funktion gerade. Daß das kein Zufall ist, sondern immer so sein muß, kann man mit Hilfe der Kettenregel leicht allgemein zeigen. Betrachten wir eine beliebige gerade Funktion  $f(x)$ . Weil sie gerade ist, muß gelten:

$$f(x) = f(-x) = f(u) \quad , \quad \text{mit } u = -x \quad (435)$$

wobei wir  $u$  als Abkürzung für  $-x$  eingeführt haben, um bei den folgenden Schritten die Übersicht zu behalten. Wenn wir Gl. 435 links und rechts nach  $x$  ableiten, erhalten wir:

$$f'(x) = \frac{d}{dx} f(x) = \frac{d}{dx} f(u) \quad (436)$$

$$= \frac{d f(u)}{du} \frac{du}{dx} \quad (437)$$

unter Verwendung der Kettenregel beim Übergang von Gl. 436 zu Gl. 437. Die “innere Ableitung”  $du/dx$  ist einfach zu bilden:

$$\frac{du}{dx} = \frac{d(-x)}{dx} = \frac{d(-1) \cdot x}{dx} = (-1) \frac{dx}{dx} = -1 \quad (438)$$

Die “äußere Ableitung”  $df(u)/du$  sieht vielleicht schwierig aus, ist aber trivial, weil der Name der Variablen ( $u$  oder  $x$ ) völlig egal sein muß. Also ergibt sich dafür:

$$\frac{d}{du} f(u) = f'(u) = f'(-x) \quad (439)$$

Also erhalten wir aus Gl. 437 dieses Resultat:

$$f'(x) = -f'(-x) \quad (440)$$

was aussagt, daß sich als erste Ableitung der geraden Funktion  $f(x)$  die ungerade Funktion  $f'(x)$  ergibt. Mit einer analogen Demonstration kann man zeigen, daß sich als Ableitung einer ungeraden Funktion  $g(x)$  die gerade Funktion  $g'(x)$  ergibt. Da wir dabei keinerlei zusätzliche Annahmen machen müssen (außer offensichtlichen wie Definiertheit, Stetigkeit und Differenzierbarkeit), gilt dies für alle Funktionen mit diesen Grundeigenschaften.

Bei Betrachtung dieser Ableitungen transzendenter Funktionen fällt auf, daß die Ableitungsfunktionen in einigen Fällen wieder transzendente Funktionen sind, in vielen Fällen aber auch einfachere Funktionen (algebraische, oder, wie etwa beim arctan Gl. 422, sogar rationale). Dies ist eine generelle Tendenz: Beim Ableiten tendieren die Funktionen dazu, sich zu vereinfachen. Dies kann man auch etwas genauer fassen: In Abschnitt 4.4 werden wir zahlreiche Funktionen in Potenzreihen entwickeln. In guter Näherung ist häufig eine Darstellung der Funktion durch eine abgebrochene Taylorreihe möglich, die also Potenzen von  $x$  bis zu einem Maximalwert  $n$  enthält. Als Folge der Ableitungsregel Gl. 388 erniedrigt sich jedoch diese Potenz auf  $n - 1$ , und auch in allen anderen Reihentermen erniedrigt sich die Potenz von  $x$  um 1. Daher ist der Funktionsverlauf der Ableitungsfunktion typischerweise einfacher als der der ursprünglichen Funktion.

Wie bereits bemerkt und in Kapitel 5 exakt gezeigt, sind Integrationsregeln Umkehrungen der Ableitungsregeln. Daher werden sich beim Integrieren die Funktionen tendenziell „verkomplizieren“. Wir werden in Kapitel 5 sehen, daß das dazu führen kann, daß scheinbar einfache Funktionstypen bei Integration in transzendente Funktionen übergehen. Tatsächlich sind viele „neue“ transzendente Funktionen über solche Integrale definiert.

#### 4.2.4 symbolische Ableitung auf dem Computer

Bei Vorliegen eines Katalogs von Ableitungen elementarer Funktionen ist die Anwendung der Ableitungsregeln auch auf komplizierte funktionale Ausdrücke eine rein mechanische Aufgabe, die dementsprechend auch von einem geeigneten Computerprogramm übernommen werden kann. Tatsächlich treten in der Praxis stellenweise Ableitungen auf, die so umfänglich werden (Resultatformeln umfassen mehrere gedruckte Buchseiten), daß man überhaupt nur noch bei Verwendung solcher computergenerierter Ableitungen eine realistische Chance hat, in akzeptabler Zeit einen fehlerfreien Ableitungsausdruck zu erhalten. Ein Beispiel dafür sind Ausdrücke für den quantenmechanischen Operator der kinetischen Energie, für Moleküle aus 5 oder mehr Atomen in krummlinigen internen Koordinaten. Dieses „symbolische Ableiten“ auf dem Computer liefert exakte analytische Ausdrücke für die Ableitung und ist daher streng zu unterscheiden vom weiter unten besprochenen „numerischen Ableiten“ (siehe Abschnitt 4.6.2), bei dem kein analytischer Ausdruck für die Ableitung produziert wird und typische Approximationen der Numerik (Ersatz von  $dx$  durch  $\Delta x$  bzw. abgebrochene Taylorreihen) verwendet werden.

Demonstration: symbolische Ableitung ♣

Als weitere Alternative gibt es auch symbolische Ableitungsprogramme, die als input Funktionen akzeptieren, die in Form von Computerprogramm-Subroutinen vorliegen, und als output entsprechende Computerprogramm-Subroutinen für die Ableitungsfunktion generieren.

#### 4.2.5 Differentiale, Fehlerrechnung

In Abschnitt 4.2.1 wurde bereits diskutiert, daß man sich trotz des im Differentialquotienten implizierten Limes die Differentiale  $dy$  und  $dx$  als endliche Größen vorstellen kann. In diesem Sinn ist es durchaus berechtigt, vom Ausdruck  $f' = dy/dx$  direkt überzugehen zu:

$$dy = f' dx \quad (441)$$

und es ist ebenso berechtigt,  $dx = \Delta x$  für irgendein finites  $\Delta x$  anzunehmen, was auch in graphischer Veranschaulichung offensichtlich ist:

Bild: Differentiale: ♣

Wie in diesem Bild ebenfalls direkt ersichtlich, ist jedoch die weitergehende Setzung  $dy \approx \Delta y$  eine Approximation, deren Güte vom Verlauf der Funktion  $f(x)$  abhängt und im allgemeinen mit Vergrößerung von  $\Delta x$  abnimmt. Umgekehrt gesehen sollte also für hinreichend kleine  $\Delta x$  die Formel

$$\Delta y \approx f' \cdot \Delta x \quad (442)$$

eine gute, erste Näherung für die Änderung  $\Delta y$  des Funktionswerts  $y = f(x)$  bei einer Änderung  $\Delta x$  des Arguments  $x$  liefern. (In den Abschnitten 4.4 und 4.6.2 werden wir sehen, daß sich Gl. 442 als Abbruch der Taylorreihenapproximation nach dem Glied 1.Ordnung erweist und daß man dementsprechend auch noch bessere Approximationen konstruieren kann.)

Gl. 442 ist die *Grundgleichung der Fehlerrechnung*, für folgende Situation: Wir haben Meßwerte  $x$  und wollen aus diesen mit einer bekannten(!, und ableitbaren) funktionalen

Vorschrift weitere Größen  $y = f(x)$  berechnen. Unsere Meßwerte sind mit Fehlern  $\Delta x$  behaftet, die wir kennen oder abschätzen können. Dann liefert uns Gl. 442 eine Möglichkeit, die Fortpflanzung unserer Meßfehler  $\Delta x$  in die berechneten Größen  $y = f(x)$  näherungsweise anzugeben. Gl. 442 liefert direkt den *absoluten Fehler*  $\Delta y$ , der je nach Vorzeichen von  $f'$  positiv oder negativ sein kann ( $\Delta x$  wird oft als per Konstruktion immer positiv aufgefaßt). Daraus können wir auch den *relativen Fehler*  $|\Delta y/y|$  berechnen (üblicherweise positiv, daher die Betragsstriche). Wegen der inhärenten Approximationseigenschaften von Gl. 442 ist jedoch unbedingt zu beachten, daß  $|f'\Delta x|$  in aller Regel *keine* obere Schranke für den *tatsächlichen* Fehler  $|\Delta y|$  darstellt!

Beispiel: ♣

#### 4.2.6 Ableitungen höherer Ordnung

Die Ableitung der Ordnung  $n$  ( $n \geq 2$ ) der Funktion  $y = f(x)$  ist die erste Ableitung der Ableitung der Ordnung  $n-1$ . In diesem Sinn liefern Ableitungen höherer Ordnungen nichts Neues, sondern sind mit den uns bereits bekannten Mitteln konstruierbar:

$$y' = f'(x) = \frac{dy}{dx} = \frac{df}{dx} \quad (443)$$

$$y'' = f''(x) = \frac{d^2y}{dx^2} = \frac{d^2f}{dx^2} = \frac{d}{dx} \left( \frac{dy}{dx} \right) = \frac{d}{dx} \left( \frac{df}{dx} \right) \quad (444)$$

$$\vdots$$

$$y^{(n)} = f^{(n)}(x) = \frac{d^ny}{dx^n} = \frac{d^nf}{dx^n} = \frac{d}{dx} \left( \frac{d^{(n-1)}y}{dx^{n-1}} \right) = \frac{d}{dx} \left( \frac{d^{(n-1)}f}{dx^{n-1}} \right) \quad (445)$$

Bei einfachen Polynomen führen höhere Ableitungen letztlich zu Konstanten bzw. zu Null:

$$y = x^4, \quad y' = 4x^3, \quad y'' = 12x^2, \quad y''' = 24x, \quad y^{(4)} = 24, \quad y^{(5)} = 0, \quad y^{(6)} = 0, \quad \dots, \quad y^{(n)} = 0, \quad n \geq 5 \quad (446)$$

Das kann aber in anderen Fällen durchaus anders aussehen:

$$y = e^x, \quad y' = e^x, \quad y'' = e^x, \quad \dots, \quad y^{(n)} = e^x, \quad n \geq 0 \quad (447)$$

$$y = \sin(x), \quad y' = \cos(x), \quad y'' = -\sin(x), \quad y''' = -\cos(x), \quad y^{(4)} = \sin(x) = y, \quad \dots, \quad (448)$$

$$y^{(n)} = \sin\left(x + \frac{n\pi}{2}\right), \quad n \geq 0 \quad (449)$$

Diese Beispiele zeigen auch, daß man u.U. in der Lage ist, allgemeine Ausdrücke für die Ableitung  $n$ -ter Ordnung anzugeben, was u.a. für die Konstruktion von Taylorreihen vorteilhaft ist.

Für höhere Ableitungen lassen sich auch einige Ableitungsregeln konstruieren, wofür hier nur zwei Beispiele angegeben werden sollen, jeweils für  $y = y(x)$ ,  $f = f(x)$  und  $g = g(x)$ , nämlich eine Summenregel:

$$y = f + g \quad (450)$$

$$y' = f' + g' \quad (451)$$

$$y'' = f'' + g'' \quad (452)$$

$$\vdots$$

$$y^{(n)} = f^{(n)} + g^{(n)} \quad (453)$$

sowie eine Produktregel:

$$y = f \cdot g \quad (454)$$

$$y' = f' \cdot g + f \cdot g' \quad (455)$$

$$y'' = f'' \cdot g + f' \cdot g' + f' \cdot g' + f \cdot g'' \quad (456)$$

$$= f'' \cdot g + 2f' \cdot g' + f \cdot g'' \quad (457)$$

$$\vdots \quad (458)$$

$$y^{(n)} = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} f^{(n-k)} \cdot g^{(k)} \quad (459)$$

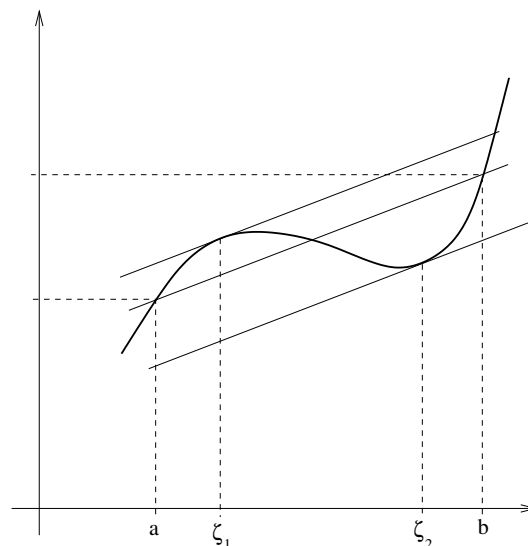
(man beachte die enge Verwandtschaft des resultierenden Ausdrucks zum Binomischen Lehrsatz!) Höhere Ableitungen im Falle der Quotientenregel werden schnell kompliziert. Prinzipiell lassen sich aber höhere Ableitungen immer „schrittweise“ aus den niedrigeren konstruieren, mit den Regeln für erste Ableitungen.

### 4.3 unbestimmte Ausdrücke

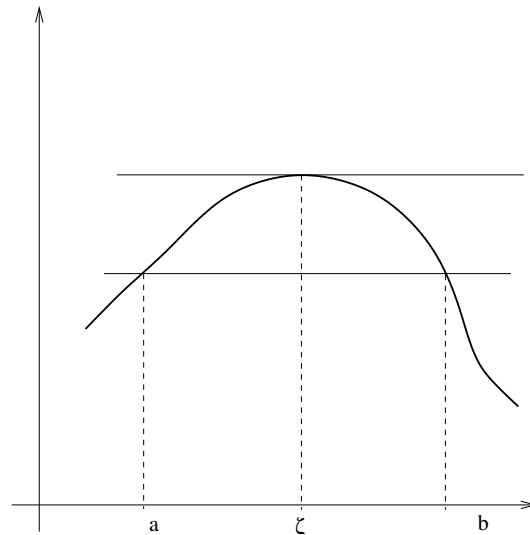
Der Mittelwertsatz der Differentialrechnung (Mittelwertsatz von Lagrange) besagt, daß für mindestens einen (ggf. auch mehrere) Werte  $\zeta \in ]a, b[$  die Tangentensteigung  $f'(\zeta)$  gleich der Sekantensteigung durch die Intervallgrenzpunkte ist:

$$\frac{f(b) - f(a)}{b - a} = f'(\zeta) \quad (460)$$

wobei  $f(x)$  stetig in  $[a, b]$  und differenzierbar in  $]a, b[$  sein muß. Eine typische Situation könnte in graphischer Veranschaulichung folgendermaßen aussehen:



Ein Spezialfall davon ist der Satz von Rolle: Wenn  $f(a) = f(b)$  (unter den gleichen Bedingungen wie oben), dann existiert mindestens ein Wert  $\zeta \in ]a, b[$ , für den  $f'(\zeta) = 0$  gilt, also eine waagerechte Tangente (Extremum; Maximum oder Minimum) vorliegt:



Beide Sätze sind in graphischer Veranschaulichung unmittelbar einsichtig.

Ähnlich dazu ist der verallgemeinerte Mittelwertsatz von Cauchy. Gegeben sind zwei Funktionen  $f(x), g(x)$ , die beide in  $[a, b]$  stetig und in  $]a, b[$  differenzierbar sind; außerdem sei  $g'(x) \neq 0$  für  $x \in ]a, b[$ . Dann gilt:

$$\frac{f(b) - f(a)}{g(b) - g(a)} = \frac{f'(\zeta)}{g'(\zeta)} \quad , \quad \text{für } \zeta \in ]a, b[ \quad (461)$$

Dabei ist besonders zu beachten, daß auf der rechten Seite von Gl. 461 in Zähler und Nenner der gleiche Wert  $\zeta$  auftaucht, weshalb der verallgemeinerte Mittelwertsatz von Cauchy keine triviale Folge des oben angeführten Mittelwertsatzes von Lagrange ist.

Zum Beweis von Gl. 461 konstruieren wir eine Hilfsfunktion  $\phi(x)$  derart, daß  $\phi(a) = \phi(b)$  gilt:

$$\phi(x) := f(x) - \frac{f(b) - f(a)}{g(b) - g(a)} g(x) \quad (462)$$

Wie man sich durch Transformation des Ausdruckes in Gl. 462 auf den Hauptnenner und Einsetzen von  $x = a$  und  $x = b$  überzeugen kann, gilt tatsächlich  $\phi(a) = \phi(b)$ . Nach dem Satz von Rolle gibt es dann jedoch einen Wert  $x = \zeta$  im Intervall  $]a, b[$ , an dem  $\phi'(\zeta) = 0$  ist. Dies ist nichts anderes als

$$f'(\zeta) - \frac{f(b) - f(a)}{g(b) - g(a)} g'(\zeta) = 0 \quad (463)$$

was sich leicht zu Gl. 461 umformen läßt, womit diese Gleichung bewiesen ist.

Für  $a = x$  und  $b = x_0$  sowie im Spezialfall  $f(x_0) = 0$  und  $g(x_0) = 0$  lautet Gl. 461:

$$\frac{f(x)}{g(x)} = \frac{f'(\zeta)}{g'(\zeta)} \quad , \quad \text{für } \zeta \in ]x, x_0[ \quad (464)$$

Da  $\zeta$  immer im Intervall  $]x, x_0[$  liegen muß, gilt beim Grenzübergang  $x \rightarrow x_0$  auch  $\zeta \rightarrow x_0$ , also können wir schreiben:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{\zeta \rightarrow x_0} \frac{f'(\zeta)}{g'(\zeta)} \quad (465)$$



Im Limesausdruck ist die Bezeichnung der Laufvariable (hier  $x$  bzw.  $\zeta$ ) ohne jeden Einfluß auf den Wert des Limes (ähnlich zur Rolle des Summationsindex in einer Summe oder der Integrationsvariablen in einem Integral), also können wir stattdessen auch schreiben:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f'(x)}{g'(x)} \quad (466)$$

Dies ist die *Regel von l'Hospital und Bernoulli*. Sie erlaubt uns, einen Grenzwert eines Quotienten, der den unbestimmten Ausdruck „0/0“ liefert (linke Seite von Gl. 466), so umzuschreiben, daß wir in Zähler und Nenner die Ableitungsfunktion bilden (rechte Seite von Gl. 466), ohne daß sich dadurch der Wert des Limes ändert. Dies gilt jedoch nur unter der Voraussetzung, daß der Limes überhaupt existiert! Ein- oder ggf. mehrfache Anwendung dieser Regel erlaubt es unter Umständen, einen sonst nicht bestimmbaren Grenzwert zu berechnen, oder sie vereinfacht die Grenzwertberechnung. Natürlich muß die Regel aber nicht immer „funktionieren“; in solchen Fällen sind dann andere Methoden zur Grenzwertbestimmung (s.o.) heranzuziehen.

Die Regel Gl. 466 läßt sich noch etwas erweitern, und zwar auf den Fall  $f(x_0) \rightarrow \pm\infty$  und  $g(x_0) \rightarrow \pm\infty$ . Ohne Beschränkung der Allgemeinheit sei  $x_0 < x < \zeta < x_1$  oder  $x_1 < \zeta < x < x_0$ . Nach dem verallgemeinerten Mittelwertsatz von Cauchy Gl. 461 gilt dann auf jeden Fall

$$\frac{g(x) - g(x_1)}{f(x) - f(x_1)} = \frac{g'(\zeta)}{f'(\zeta)} \quad (467)$$

Multiplikation dieser Gleichung mit  $f'(\zeta)/g'(\zeta)$  und mit  $f(x)/g(x)$  liefert:

$$\frac{1 - \frac{g(x_1)}{g(x)} \frac{f'(\zeta)}{f'(\zeta)}}{1 - \frac{f(x_1)}{f(x)} \frac{g'(\zeta)}{g'(\zeta)}} = \frac{f(x)}{g(x)} \quad (468)$$

Beim Grenzübergang  $\zeta \rightarrow x_0$  gilt wegen der angegebenen Intervallschachtelung auch  $x \rightarrow x_0$ . Sei jedoch  $x_1$  ein fester Wert, und  $f(x_1)$  und  $g(x_1)$  seien finit. Wegen  $f(x_0) \rightarrow \pm\infty$  und  $g(x_0) \rightarrow \pm\infty$  gilt dann nach Gl. 341

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x_1)}{f(x)} = 0 \quad , \quad \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{g(x_1)}{g(x)} = 0 \quad (469)$$

Damit ist gezeigt, daß der erste Faktor auf der linken Seite von Gl. 468 im Limes  $x \rightarrow x_0$  gegen 1 geht. In diesem Limes ergibt sich also auch hier wieder derselbe Ausdruck Gl. 466. Damit gilt die Regel von l'Hospital und Bernoulli nicht nur für Grenzwerte, die gegen den unbestimmten Ausdruck „0/0“ streben, sondern auch für den Fall „ $\infty/\infty$ “.

Mit geeigneten Umformungen kann man auch andere potentiell unbestimmte Ausdrücke auf eine dieser beiden Quotientenformen bringen. Im Fall  $f(x) \cdot g(x)$  mit  $f(x_0) = 0$  und  $g(x_0) = \infty$  (also für den unbestimmten Ausdruck „ $0 \cdot \infty$ “) kann man folgende Umformung anwenden

$$f(x) \cdot g(x) = \frac{f(x)}{\frac{1}{g(x)}} \quad (470)$$

die auf einen Quotientenausdruck der Form „0/0“ führt, also einen der beiden obigen Standardfälle.

Ähnlich kann man bei „ $\infty - \infty$ “ verfahren, also  $f(x) - g(x)$  mit  $f(x_0) = \infty$  und  $g(x_0) = \infty$ . Mit Hilfe von

$$f(x) - g(x) = \frac{f(x)g(x)}{g(x)} - \frac{f(x)g(x)}{f(x)} \quad (471)$$

kann man in den beiden einzelnen Summanden die Form „ $\infty/\infty$ “ erreichen. Alternativ kann man folgende Umformung verwenden

$$f(x) - g(x) = (f(x) - g(x)) \frac{f(x)g(x)}{f(x)g(x)} = \frac{f(x)-g(x)}{\frac{1}{f(x)g(x)}} = \frac{\frac{1}{g(x)} - \frac{1}{f(x)}}{\frac{1}{f(x)g(x)}} \quad (472)$$

was die Form „ $0/0$ “ liefert.

## 4.4 Taylorreihen

Eine Funktion  $y = f(x)$  soll in einer Umgebung der Stelle  $x = x_0$  durch ein Polynom  $y = \tilde{f}(x)$  ersetzt werden.

$$f(x) \approx \tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (x - x_0)^i \quad (473)$$

Man beachte, daß dadurch die funktionale Form der Reihe bereits vorgegeben ist. Lediglich die Koeffizienten  $a_i$  sind noch unbekannt. Näherungsreihen für unterschiedliche Funktionen  $f(x)$  unterscheiden sich demzufolge auch nur in den Werten der Koeffizienten.

Der entscheidende Punkt ist, daß durch Gl. 473 eine möglicherweise komplizierte (z.B. transzendente) Funktion  $f(x)$  wenigstens in dieser Umgebung durch eine sehr einfache Funktion (Polynom) ersetzt wird. Dies ermöglicht dann häufig einfachere Argumentationen und Abschätzungen, oder effektive Näherungen an die komplizierte Funktion. Daher ist die Taylorreihe die vermutlich wichtigste Näherung in den Naturwissenschaften und in der numerischen Mathematik überhaupt. Auch in der reinen Mathematik ist die Taylorreihe sehr nützlich, z.B. sind damit bestimmte Sätze (z.B. zur Stetigkeit) von Potenzreihen auf kompliziertere Funktionen erweiterbar, schwierige Integranden können näherungsweise integriert werden, usw.

Eine Schwierigkeit besteht darin, daß die Potenzreihe, wie in Gl. 473 angedeutet, ggf. unendlich viele Glieder hat — tatsächlich ist das für die Fähigkeit des Polynoms, schwierigere Funktionen wenigstens in Teilintervallen exakt zu „simulieren“, sogar entscheidend. Damit erhebt sich aber die Frage, ob die unendliche Potenzreihe überhaupt konvergiert (also die Reihensumme endlich bleibt), bzw. für welche Werte von  $x$  sie das tut. Allgemeineres und detaillierteres zur Konvergenz von Reihen wird in MfC2 behandelt; hier finden kleine Vorgriffe darauf statt, ohne nähere Diskussion und Begründung. Die Konvergenz hängt hier vor allem von der Entwicklung der Werte der Koeffizienten  $a_i$  für  $i \rightarrow \infty$  ab. Da die Koeffizienten ihrerseits von der durch die Taylorreihe darzustellenden, ursprünglichen Funktion  $f(x)$  abhängen (s.u.), ist für jede Taylorreihenentwicklung erneut die Konvergenz zu untersuchen. Typischerweise stellt man fest, daß Konvergenz innerhalb eines gewissen Intervalls  $b < x < c$  vorliegt. Mit komplexer Analysis kann man zeigen, daß die Konvergenz dadurch determiniert ist, wie weit die nächstliegende Singularität von  $f(x)$  in der komplexen Zahlenebene entfernt ist; Konvergenz ist dann innerhalb eines *Konvergenzradius* gegeben, der Radius eines Kreises um den Entwicklungspunkt, der die nächstliegende Singularität gerade eben nicht umfaßt. Singularitäten im Reellen sind z.B. Polstellen, die durch die vorgegebene Form der Potenzreihe Gl. 473 offenbar nicht dargestellt werden können. Um dies auch noch zu ermöglichen, müßte man die Potenzreihe durch Terme der Art  $1/x$  ergänzen, wodurch man zu Laurentreihen kommt, die hier jedoch nicht behandelt werden sollen.

Von der Konvergenz (bei unendlich vielen Reihengliedern) zu unterscheiden ist die Güte der Näherung an die Zielfunktion  $f(x)$ , die die Potenzreihe in abgebrochener Form liefert (mit endlich vielen Gliedern, in der Praxis häufig nur sehr wenige Glieder). (**bedingte Konvergenz: ♣**) Die Güte der Näherung hängt in der Praxis vor allem auch davon ab, wie dicht am Entwicklungspunkt  $x_0$  die Reihennäherung verwendet wird. Die Näherungsgüte kann durch eine Abschätzung des vernachlässigten Teils der Reihe (der unendlich viele Glieder umfaßt!) erfolgen. Hier wird dafür das Restglied nach Lagrange vorgestellt.

#### 4.4.1 Definition und Konvergenz

Die Taylorreihe ergibt sich durch die Forderung, daß die Funktion  $f(x)$  und die Potenzreihe  $\tilde{f}(x)$  am *Entwicklungspunkt*  $x = x_0$  im Funktionswert und in allen Ableitungen exakt übereinstimmt (was implizit auch erfordert, daß  $y = f(x)$  an  $x = x_0$  beliebig oft differenzierbar ist).

Daraus ergeben sich direkt Bestimmungsgleichungen für die bis dato unbekannten Koeffizienten  $a_i$ , wie in den folgenden Gleichungen gezeigt. In jeder Zeile sind dabei durch die Setzung  $x = x_0$  alle Reihenglieder Null, bis auf das Glied mit  $(x - x_0)^j$ , für das  $j = 0$  gilt, was in jeder Zeile an einer anderen Stelle der Fall ist ( $j = i$ ,  $j = i - 1$ ,  $j = i - 2$ , usw., allgemein  $j = i - n$ ):

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i (x - x_0)^i \Rightarrow \tilde{f}(x_0) = 0! a_0 := f(x_0) \Rightarrow a_0 = f(x_0) \quad (474)$$

$$\tilde{f}'(x) = \sum_{i=1}^{\infty} i a_i (x - x_0)^{i-1} \Rightarrow \tilde{f}'(x_0) = 1! a_1 := f'(x_0) \Rightarrow a_1 = f'(x_0) \quad (475)$$

$$\tilde{f}''(x) = \sum_{i=2}^{\infty} i(i-1) a_i (x - x_0)^{i-2} \Rightarrow \tilde{f}''(x_0) = 2! a_2 := f''(x_0) \Rightarrow a_2 = \frac{1}{2!} f''(x_0) \quad (476)$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$\tilde{f}^{(n)}(x) = \sum_{i=n}^{\infty} k a_i (x - x_0)^{i-n} \Rightarrow \tilde{f}^{(n)}(x_0) = n! a_n := f^{(n)}(x_0) \Rightarrow a_n = \frac{1}{n!} f^{(n)}(x_0) \quad (477)$$

wobei aus rein layout-ästhetischen Gründen in der letzten Zeile Gl. 477 die Abkürzung  $k = i(i-1)(i-2)\cdots(i-n+1)$  verwendet wurde. Damit sind die Koeffizienten  $a_i$  im allgemeinen Fall alle bestimmt; wie sich zeigt, enthalten sie neben allgemeinen Konstanten (den Fakultäten  $n!$ ) vor allem die  $n$ -te Ableitung der zu entwickelnden Funktion, ausgewertet am Entwicklungspunkt (was im konkreten Fall auch Zahlenkonstanten sind, keine Funktionen!). Schreiben wir diese allgemeinen Koeffizientenausdrücke in den Ansatz Gl. 473, lautet daher die *Taylorreihe* im allgemeinen Fall:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(x_0)}{i!} (x - x_0)^i \quad (478)$$

Für den Spezialfall  $x_0 = 0$  (Entwicklung um den Ursprung) wird die Taylorreihe häufig auch als *McLaurin*-Reihe bezeichnet:

$$\tilde{f}(x) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{f^{(i)}(x_0)}{i!} x^i \quad (479)$$

Wie gezeigt, stimmen  $f(x)$  und  $\tilde{f}(x)$  per Konstruktion im Entwicklungspunkt in Funktionswert und allen Ableitungen überein. Im Spezialfall, daß die zu entwickelnde Funktion  $f(x)$  bereits ein Polynom  $n$ -ter Ordnung ist, gilt diese Übereinstimmung auch an allen anderen Punkten, da dann  $f(x)$  und  $\tilde{f}(x)$  identisch sind, wenn  $\tilde{f}(x)$  ebenfalls Terme bis zur  $n$ -ten Ordnung enthält (die Potenzreihenentwicklung einer Funktion ist eindeutig, s.u., daher kann sich bei der Taylorreihenentwicklung keine anderslautende Reihe ergeben). In allen anderen Fällen ergibt sich diese Identität abseits vom Entwicklungspunkt  $x = x_0$  nur innerhalb des Konvergenzintervalls *und* nur im Limes unendlich vieler Reihenglieder.

Eine allgemeine Untersuchung der Konvergenz von Reihen (siehe MfC2) der Form  $\sum_{k=0}^{\infty} g_k(x)$  zeigt, daß die einsichtige Bedingung, daß aufeinanderfolgende Reihenglieder betragsmäßig abnehmen und für  $k \rightarrow \infty$  gegen Null streben sollten, zwar notwendig aber nicht hinreichend ist. Eine hinreichende Bedingung liefert das Quotientenkriterium von Cauchy und D'Alembert, wonach gilt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{g_{k+1}(x)}{g_k(x)} \right| \begin{cases} < 1 & \Rightarrow \text{Konvergenz} \\ > 1 & \Rightarrow \text{Divergenz} \\ = 1 & \Rightarrow \text{unentschieden} \end{cases} \quad (480)$$

(Man beachte, daß man in dem Fall, in dem das Quotientenkriterium den Wert Eins liefert, über das Konvergenzverhalten der Reihe anhand dieses Kriteriums keine Aussage machen kann. Stattdessen muß man andere Kriterien (davon gibt es mehrere) heranziehen, um festzustellen, ob die Reihe für diesen  $x$ -Wert tatsächlich konvergiert oder divergiert.)

Das Quotientenkriterium gilt in der angegebenen Form für völlig beliebige Reihen der Form  $\sum_{k=0}^{\infty} g_k(x)$ . Für Potenzreihen läßt sich das Quotientenkriterium etwas spezieller fassen: Unsere Reihenglieder sind von der Form  $g_k = a_k x^k$ , also können wir folgende Umformung verwenden:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1} x^{k+1}}{a_k x^k} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1} x}{a_k} \right| = |x| \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| \quad (481)$$

Damit ergeben sich folgende Fälle:

$$\text{Fall 1: } \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| = \infty \quad \text{Divergenz} \quad (482)$$

$$\text{Fall 2: } \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| = 0 \quad \text{Konvergenz für alle } -\infty < x < +\infty \quad (483)$$

$$\text{Fall 3: } \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| = c \quad \text{mit } 0 < c < \infty \quad (484)$$

Im ersten Fall ergibt sich Divergenz für alle endlichen und von Null verschiedenen  $x$ -Werte. Im zweiten Fall ist die Potenzreihe konvergent für alle endlichen  $x$ -Werte (nicht für  $|x| = \infty$ , weil  $0 \cdot \infty$  ein unbestimmter Ausdruck ist, sodaß sich darüber hiermit nichts näheres aussagen läßt). Im dritten Fall (und *nur* in diesem Fall) können wir durch den

endlichen Wert  $c$  dividieren und erhalten Konvergenz für alle  $|x| < 1/c$ , bzw. Konvergenz für alle  $-R < x < +R$ , wobei der Konvergenzradius  $R$  gegeben ist durch

$$\text{Fall 3: Konvergenz im Radius} \quad R = c^{-1} = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_k}{a_{k+1}} \right| \quad (485)$$

Man beachte, daß Gl. 485 *keine* Aussage über das Verhalten bei  $x = -R$  oder  $x = +R$  macht (beide Fälle entsprechen dem Fall, daß sich beim Quotientenkriterium das unklare Resultat Eins ergibt). Diese beiden Fälle sind also immer gesondert zu überprüfen. Tatsächlich können sich alle drei Möglichkeiten ergeben, also Konvergenz an beiden Intervallrändern, an nur einem (s.u.: Taylorreihe für  $\ln(1+x)$ ), oder an keinem.

In der Praxis sind unendlich viele Glieder in der Regel weder möglich noch gewollt. Der „Fehler“ (Differenz zwischen zu entwickelnder Funktion  $f(x)$  und abgebrochenem Taylorpolynom  $n$ -ter Ordnung  $T_n(x)$ ) kann mithilfe des *Restglieds  $n$ -ter Ordnung nach Lagrange*  $R_n$  angegeben werden:

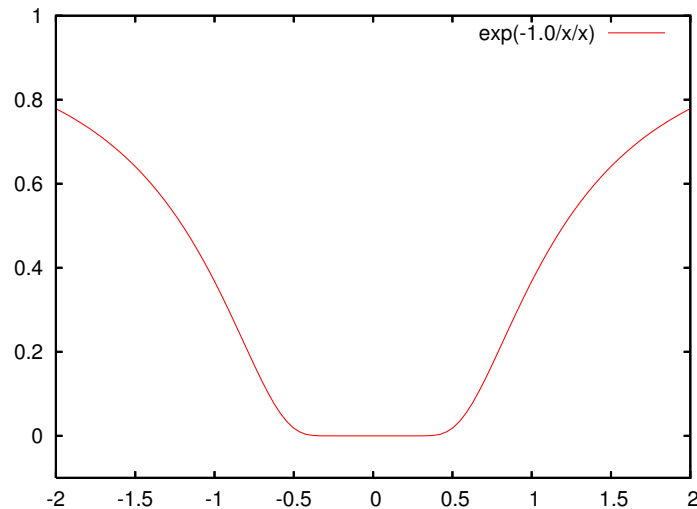
$$\tilde{f}(x) = T_n(x) + R_n(\zeta, x) = f(x) \quad (486)$$

$$\text{mit } R_n(\zeta, x) = \frac{f^{(n+1)}(\zeta)}{(n+1)!} (x - x_0)^{(n+1)} \quad , \quad \zeta \in [x_0, x] \quad (487)$$

Dabei ist zu beachten, daß dieses Restglied von derselben Form ist wie das Taylorreihenglied  $(n+1)$ -ter Ordnung, jedoch mit Auswertung der  $(n+1)$ -ten Ableitung an der Stelle  $\zeta$  und nicht an der Stelle  $x_0$ . Dieser Wert  $\zeta$  ist im Intervall  $[x_0, x]$  so zu wählen, daß das Restglied  $R_n$  maximal wird. Der Grund für dieses hier etwas merkwürdig wirkende Auftreten von  $\zeta$  wird in der (etwas aufwendigen) Herleitung der Restgliedformel in Abschnitt 4.4.4 klar werden.

Aus den Gln. 477 bzw. 478 ergibt sich auch gleich ein Rezept, die Taylorreihe  $\tilde{f}(x)$  zu einer beliebigen, gegebenen Funktion  $f(x)$  um einen gegebenen Entwicklungspunkt  $x = x_0$  zu bestimmen: Offenbar genügt es für die Aufstellung der Taylorreihe bis zum Glied  $n$ -ter Ordnung, die zu entwickelnde Funktion  $n$  mal abzuleiten und den Wert der Ableitungsfunktionen am Entwicklungspunkt zu bestimmen, was in Abschnitt 4.4.2 für einige Beispiele gezeigt werden soll. In Abschnitt 4.4.3 werden einige Alternativrezepte zur Aufstellung von Taylorreihen gezeigt, die oftmals einfacher und schneller sein können als das Standardrezept über die Ableitungen der zu entwickelnden Funktion.

Dabei sind allerdings einige Punkte zu beachten: Das „Standardrezept“ kann versagen, wenn die Funktion am Entwicklungspunkt nicht  $n$  mal differenzierbar ist. Selbst wenn dieses Rezept oder auch eines der Alternativrezepte funktioniert, ist nicht damit nichts über das Konvergenzverhalten der resultierenden Reihe ausgesagt. Dieses ist also nachträglich noch zu untersuchen. Ein einfaches Beispiel dafür ist die Funktion  $y = \exp(-1/x^2)$ . Sie hat an der Stelle  $x = 0$  den legitimen Funktionswert Null (wegen  $\lim_{x \rightarrow 0} 1/x^2 = \infty$  und  $\lim_{x \rightarrow \infty} \exp(-x) = 0$ ) und ist dort auch stetig und differenzierbar. Funktionswert und alle Ableitungen an der Stelle  $x_0 = 0$  sind jedoch Null, und damit sind auch alle Terme in der Taylorreihe um  $x_0 = 0$  Null, d.h. die Taylorreihe ist die Gleichung der  $x$ -Achse. Dies hat jedoch mit dem Funktionsverlauf von  $y = \exp(-1/x^2)$  nur in einer sehr kleinen Umgebung von  $x_0 = 0$  etwas zu tun:



Schlimmstenfalls kann sich in pathologischen Fällen eine Reihe ergeben, die zwar (per Konstruktion) am Entwicklungspunkt korrekt ist, aber auch *fast nur* dort — dann hat der Verlauf von  $\tilde{f}(x)$  außer in einem für praktische Belange sinnlos kleinen Intervall um  $x_0$  nichts mit dem Funktionsverlauf von  $f(x)$  zu tun, was die Reihe praktisch unbrauchbar macht.

#### 4.4.2 Beispiele für Konstruktion und Konvergenzabschätzung

Wie bereits oben bemerkt, wäre die Funktion  $x^n$  mit  $n \in \mathbb{N}$  ein erstes Beispiel, aber zu trivial, da dann das Taylorpolynom identisch ist zur Funktion selbst, und unabhängig vom Entwicklungspunkt. Interessanter ist der Fall  $x^\alpha$  mit Werten wie  $\alpha = 1/2$  oder  $\alpha = -1/2$ . Im letzteren Fall ist die Funktion bei  $x_0 = 0$  jedoch nicht definiert, also entwickeln wir um  $x_0 = 1$ , oder (was auf dasselbe hinausläuft) wir entwickeln die Funktion  $y = (1+x)^\alpha$  (mit  $\alpha \in \mathbb{R}$ ) um  $x_0 = 0$ . Nach den Gln. 474 bis 477 ergibt sich:

$$f(x) = (1+x)^\alpha, \quad f(0) = 1 = a_0 \quad (488)$$

$$f'(x) = \alpha(1+x)^{\alpha-1}, \quad f'(0) = \alpha = a_1 \quad (489)$$

$$f''(x) = \alpha(\alpha-1)(1+x)^{\alpha-2}, \quad f''(0) = \alpha(\alpha-1) = 2! a_2 \quad (490)$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$f^{(n)}(x) = \alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-n+1)(1+x)^{\alpha-n}, \quad f^{(n)}(0) = \alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-n+1) = n! a_n \quad (491)$$

Die Taylorreihe für  $y = (1+x)^\alpha$  lautet damit:

$$(1+x)^\alpha \approx 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-k+1)}{k!} x^k = 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2} x^2 + \cdots \quad (492)$$

Wie oben diskutiert ist nun festzustellen, für welche  $x$ -Werte diese Reihe konvergiert (was, wie sich zeigt, gerade in diesem Fall sehr wichtig ist). Mit der spezialisierten Version

des Quotientenkriteriums Gl. 485 ergibt sich:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{\alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-k+1)}{k!} \cdot \frac{(k+1)!}{\alpha(\alpha-1) \cdots (\alpha-k+1)(\alpha-k)} \right| = \quad (493)$$

$$= \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{k+1}{\alpha-k} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{1 + \frac{1}{k}}{\frac{\alpha}{k} - 1} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} |-1| = 1 \quad (494)$$

Für  $|x| = 1$  ist das Konvergenzverhalten nach diesem Kriterium unklar; eine genauere Untersuchung zeigt, daß bei  $|x| = 1$  tatsächlich keine Konvergenz vorliegt. Damit ist die Taylorreihe Gl. 492 für  $|x| < 1$  konvergent und verwendbar; für  $|x| \geq 1$  darf diese Reihe jedoch nicht verwendet werden.

Diese Taylorreihe Gl. 492 für die Funktion  $(1+x)^\alpha$  sieht auf den ersten Blick unbekannt und etwas kompliziert aus. Spezialfälle davon sind jedoch einfach und bereits bekannt:

Im Fall  $\alpha = m > 0$  mit  $m \in \mathbb{N}$  ergibt sich:

$$f(x) = (1+x)^m = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{m(m-1) \cdots (m-i+1)}{i!} x^i = \dots \quad (495)$$

(Hier wie auch im folgenden Fall ergibt sich statt einer Approximation eine exakte Identität, daher die ersten Gleichheitszeichen.) Im letzten Ausdruck verschwinden alle Glieder mit  $i > m$ , da dann immer ein Faktor Null im Zähler auftritt. Es ergibt sich also eine endliche Summe, die nur bis  $i = m$  läuft. Erweitern wir zusätzlich mit  $(m-i)!$ , erhalten wir:

$$\dots = \sum_{i=0}^m \frac{m!}{i!(m-i)!} x^i = \sum_{i=0}^m \binom{m}{i} x^i \quad (496)$$

was nichts anderes ist als der binomische Lehrsatz (der hier für  $|x| < 1$  „wiederentdeckt“ wird; tatsächlich gilt er bekanntlich auch im erweiterten Bereich  $|x| > 1$ ).

Im Fall  $\alpha = -1$  wird aus Gl. 492 folgendes.

$$f(x) = (1+x)^{-1} = 1 + \sum_{i=1}^{\infty} \frac{(-1)(-2) \cdots (-i)}{i!} x^i = \dots \quad (497)$$

Der Zähler im letzten Ausdruck ist nichts anderes als  $(-1)^i i!$ , sodaß wir erhalten:

$$\dots = \sum_{i=0}^{\infty} (-1)^i x^i = \sum_{i=0}^{\infty} (-x)^i \quad (498)$$

Mit der Ersetzung  $x = -q$  für  $q \in \mathbb{R}$  ergibt sich schließlich:

$$\frac{1}{1-q} = \sum_{i=0}^{\infty} q^i = 1 + q + q^2 + \dots \quad (499)$$

Dies ist die *geometrische Reihe* und ihre Summenformel, gültig für  $|q| < 1$ .

Tatsächlich liefert die Reihe Gl. 492 also nur etwas Neues für andere Werte von  $\alpha$ . Eine typische Verwendung ist z.B. die Ersetzung

$$(1+x)^\alpha \approx 1 + \alpha x \quad (500)$$

$$\text{z.B.: } \sqrt{1+x} \approx 1 + \frac{1}{2}x \quad (501)$$

was für  $|x| \ll 1$  eine gute Approximation sein kann und gerne auch bei der Herleitung physikalischer Zusammenhänge verwendet wird.

Als weiteres Beispiel betrachten wir die Logarithmusfunktion.  $\ln x$  ist an der Stelle  $x_0 = 0$  nicht entwickelbar, da dieser Punkt außerhalb des Definitionsbereichs liegt. Wie im vorigen Beispiel entwickeln wir daher um  $x_0 = 1$  bzw. betrachten äquivalent dazu die Entwicklung von  $\ln(1+x)$  um  $x_0 = 0$ . Hier entwickeln wir also erstmals eine transzendente Funktion in eine Potenzreihe, was jedoch an unserem „Standardrezept“ nichts ändert. Nach den Gln. 474 bis 477 ergibt sich:

$$f(x) = \ln(1+x), \quad f(0) = 0 = a_0 \quad (502)$$

$$f'(x) = (1+x)^{-1}, \quad f'(0) = 1 = a_1 \quad (503)$$

$$f''(x) = -(1+x)^{-2}, \quad f''(0) = -1 = 2! a_2 \quad (504)$$

$$f'''(x) = 2(1+x)^{-3}, \quad f'''(0) = 2 = 3! a_3 \quad (505)$$

$$f^{(4)}(x) = -2 \cdot 3(1+x)^{-4}, \quad f^{(4)}(0) = -6 = 4! a_4 \quad (506)$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$f^{(n)}(x) = (-1)^{(n-1)}(n-1)!(1+x)^{-n}, \quad f^{(n)}(0) = (-1)^{(n-1)}(n-1)! = n! a_n \quad (507)$$

Aus der letzten Zeile Gl. 507 ergibt sich allgemein für den Koeffizienten  $a_n$  folgende Formel:

$$a_n = (-1)^{(n-1)} \frac{(n-1)!}{n!} = \frac{(-1)^{(n-1)}}{n} \quad (508)$$

also lautet die Taylorreihe für  $y = \ln(1+x)$  um  $x_0 = 0$  folgendermaßen:

$$\ln(1+x) \approx \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{(n-1)}}{n} x^n = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} - \frac{x^4}{4} + \dots \quad (509)$$

Nach Gl. 485 ergibt sich der Konvergenzradius zu:

$$R = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{n+1}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n}\right) = 1 \quad (510)$$

Die Reihe ist also sicher konvergent für  $-1 < x < +1$ . An den Rändern dieses Bereichs erhalten wir die speziellen Reihen

$$x = +1 \Rightarrow 1 - \frac{1}{2} + \frac{1}{3} - \frac{1}{4} + \dots \quad (511)$$

$$x = -1 \Rightarrow -1 \left(1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} + \dots\right) \quad (512)$$

Die zweite dieser Reihen ist die harmonische Reihe. Obwohl ihre Glieder sukzessive kleiner werden und gegen Null streben, zeigt eine detailliertere Untersuchung, daß diese Reihe trotzdem divergiert. Die erste Reihe ist die alternierende Variante der harmonischen Reihe und ist tatsächlich konvergent (was bei Alternanz offenbar leichter möglich ist). Daher ist die in Gl. 509 gegebene Taylorreihe für  $\ln(1+x)$  konvergent für alle  $-1 < x \leq +1$ , sonst divergent.

Weitere Taylorreihen für häufige transzendente Funktionen lassen sich mit weniger Aufwand herleiten:



Für  $f(x) = e^x$  sind alle Ableitungen gegeben durch  $f^{(n)}(x) = e^x$ . Demzufolge ist leicht ersichtlich, daß alle Ableitungen bei  $x = 0$  den Wert Eins haben. Also ergibt sich die Taylorreihe für  $f(x) = e^x$  um den Entwicklungspunkt  $x_0 = 0$  in einfachster Weise direkt aus Gl. 479 zu:

$$e^x \approx \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3!} + \dots \quad (513)$$

Ähnlich einfach folgt das Konvergenzintervall dieser Reihe: Nach den Gln. 482 bis 484 gilt hier (unter Verwendung von Gl. 341):

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{k!}{(k+1)!} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{(k+1)} \right| = 0 \quad (514)$$

Dies ist offenbar Fall 2, Gl. 483, m.a.W. die Taylorreihe Gl. 513 für  $e^x$  konvergiert für alle  $x \in ]-\infty, +\infty[$ , also für alle endlichen  $x$ .

Für  $f(x) = \sin x$  ergibt sich nach den Gln. 474 bis 477 für den Entwicklungspunkt  $x_0 = 0$ :

$$f(x) = \sin(x), \quad f(0) = 0 = a_0 \quad (515)$$

$$f'(x) = \cos(x), \quad f'(0) = 1 = a_1 \quad (516)$$

$$f''(x) = -\sin(x), \quad f''(0) = 0 = 2! a_2 \quad (517)$$

$$f'''(x) = -\cos(x), \quad f'''(0) = -1 = 3! a_3 \quad (518)$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

Damit erhalten wir:

$$\sin x \approx \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - + \dots \quad (519)$$

Man beachte, daß diese Reihe im Vergleich zur Reihe für  $e^x$  nicht nur alterniert, sondern auch nur ungerade Glieder enthält, in Übereinstimmung mit der Tatsache, daß  $f(x) = \sin x$  eine ungerade Funktion ist. Wiederum können wir die Gln. 482 bis 484 zur Überprüfung der Reihenkonvergenz verwenden:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{(2k+1)!}{(2k+3)!} \right| = \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{1}{(2k+2)(2k+3)} \right| = 0 \quad (520)$$

und auch hier ergibt sich Konvergenz für alle endlichen  $x$ .

Die Taylorreihe für  $f(x) = \cos x$  könnten wir in perfekter Analogie zur Taylorreihe für  $f(x) = \sin x$  herleiten. Noch einfacher ist es jedoch, die Beziehung  $\frac{d \sin x}{dx} = \cos x$  zu verwenden, also die Taylorreihe für  $\cos x$  einfach durch Ableitung der Taylorreihe für  $\sin x$  zu erzeugen. In beiden Fällen erhalten wir:

$$\cos x \approx \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{x^{2k}}{(2k)!} = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - + \dots \quad (521)$$

Wie zu erwarten war, erhalten wir hier lediglich Potenzen gerader Ordnung. In derselben Weise wie bei der Reihe für  $\sin x$  ergibt sich auch hier Konvergenz für alle endlichen  $x$ .

Auf S.69 hatten wir mit Hilfe der Kettenregel allgemein gezeigt, daß sich die Symmetrie einer Funktion (soweit vorhanden) bei Ableitung umkehrt (aus einer geraden Funktion wird eine ungerade, und umgekehrt). Wie wir hier anhand der Gln. 519 und 521 sehen, könnten wir diesen Befund auch mit Hilfe der Taylorentwicklung und der Potenz-Ableitungsregel Gl. 388 auf den einfachen Zusammenhang zwischen (un)geraden Potenzen und (un)geraden Funktionen zurückführen.

### 4.4.3 Standardtaylorreihen

Anstatt für weitere elementare Funktionen Taylorreihen mit den bisherigen Mitteln herzuleiten, registrieren wir, daß mit den in Abschnitt 4.4.2 ermittelten Reihen für die Funktionen  $(1+x)^\alpha$ ,  $\ln(1+x)$ ,  $e^x$ ,  $\sin x$  und  $\cos x$  (Gln. 492, 509, 513, 519 und 521) bereits Taylorreihen für sehr viele Bestandteile zusammengesetzter Funktionen vorliegen — wobei daran erinnert sei, daß  $(1+x)^\alpha$  auch die wesentlichen Ingredienzien von Funktionenklassen wie Polynomen  $((1+x)^n)$ , gebrochen rationalen Funktionen  $(1/(1+x))$  und algebraischen Funktionen  $(\sqrt{1+x})$  enthält.

Man kann beweisen, daß die Potenzreihenentwicklung einer Funktion eindeutig ist (*Identitätssatz*; dies ist, nebenbei bemerkt, auch eine exakte Grundlage für den in Abschnitt 3.1.4 im Zusammenhang mit der Partialbruchzerlegung auf S. 34 nur etwas vage begründeten Koeffizientenvergleich). Daher erhalten wir immer dieselbe Potenzreihe, unabhängig vom Beschaffungsweg (solange dieser korrekt ist). Man muß also nicht das in Abschnitt 4.4.2 angegebene und in einigen Beispielen demonstrierte „Standardrezept“ über die Ableitungen der zu entwickelnden Funktion befolgen, sondern kann tatsächlich versuchen, auf verschiedene Weisen neue Taylorreihen aus bereits bekannten zusammenzusetzen, was im folgenden anhand verschiedener Beispiele demonstriert werden soll: siehe Vorlesung ♣

Insbesondere ist es mit diesen Mitteln häufig leicht möglich, Taylorreihen um andere Entwicklungspunkte als  $x_0 = 0$  aus den Standardreihen zu gewinnen: So erhalten wir zum Beispiel mit der Substitution  $u = x - 1$  (was  $u = 0$  für  $x = 1$  impliziert) sehr einfach die Taylorreihe von  $\ln(x)$  um  $x_0 = 1$ :

$$\ln x = \ln(1 + (x - 1)) = \ln(1 + u) \quad (522)$$

$$= u - \frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{3} - \frac{u^4}{4} + \dots \quad (523)$$

$$= (x - 1) - \frac{1}{2}(x - 1)^2 + \frac{1}{3}(x - 1)^3 - \frac{1}{4}(x - 1)^4 + \dots \quad (524)$$

In völlig analoger Weise läßt sich als weiteres Beispiel die Funktion  $\cos(x)$  um  $x_0 = 3\pi/2$  entwickeln, unter Verwendung von  $u = x - 3\pi/2$ , also wieder  $u = 0$  für  $x = 3\pi/2$ :

$$\cos x = \cos\left(\frac{3\pi}{2} + (x - \frac{3\pi}{2})\right) \quad (525)$$

$$= \sin(x - \frac{3\pi}{2}) = \sin u \quad (526)$$

$$= u - \frac{u^3}{3!} + \frac{u^5}{5!} - \dots \quad (527)$$

$$= (x - \frac{3\pi}{2}) - \frac{1}{3!}(x - \frac{3\pi}{2})^3 + \frac{1}{5!}(x - \frac{3\pi}{2})^5 - \dots \quad (528)$$

wobei zusätzlich verwendet wurde:

$$\cos(x - \frac{\pi}{2}) = \sin x \quad (529)$$

$$\text{und} \quad \cos(x + 2\pi) = \cos x \quad (530)$$

$$\text{also} \quad \cos(x + 2\pi - \frac{\pi}{2}) = \cos(x + 3\pi/2) = \sin x \quad (531)$$

#### 4.4.4 Restglied

### 4.5 Kurvendiskussion

### 4.6 Numerische Differentiation

#### 4.6.1 numerische Zahlendarstellung

Der erste wesentliche Unterschied zwischen analytischen Rechnungen (symbolische Manipulationen “mit Papier und Bleistift”) und numerischen (reine Zahlenrechnung, ohne Symbole; heute in der Regel auf einem Computer) ist, daß der Umfang darstellbarer Zahlen begrenzt ist, sowohl was ihre Größe angeht als auch die Anzahl darstellbarer signifikanter Dezimalstellen (ganzzahlige Rechnungen werden hier nicht betrachtet). Sowohl die Rechenregister als auch der Hauptspeicher eines Computers (und auch seine Festplatte(n)) haben einen begrenzten Speicherumfang, daher wird einzelnen Zahlen auch nur eine begrenzte Anzahl von Bits (0 bzw. 1 in Binärdarstellung) bzw. Bytes (1 Byte = 8 Bit) zugewiesen. Die Grundform der Darstellung reeller Zahlen ist:

$$\text{Vorzeichen} \times \text{Mantisse} \times \text{Basis}^{\text{Exponent}} \quad (532)$$

Das Vorzeichen ist natürlich “plus” oder “minus”, und in gängigen Repräsentationen wird die Zahl 2 als Basis verwendet. Für die gesamte Darstellung inklusive Mantisse und Exponent werden in sogenannter einfacher Genauigkeit (*single precision*) auf vielen Maschinen 4 Bytes verwendet. Damit ergeben sich die folgenden Charakteristika der Darstellung (zwei der sogenannten *Maschinenkonstanten*):

$$\begin{array}{ll} \text{Overflow threshold} & = 3.40282347\text{E}+38 \\ \text{Epsilon} & = 5.96046448\text{E}-08 \end{array}$$

Die größte darstellbare Zahl in einfacher Genauigkeit ist also ca.  $3.4 \times 10^{38}$ ; noch größere Zahlen sind nicht von “unendlich” unterscheidbar. In doppelter Genauigkeit (8 Bytes, *double precision*) lauten die entsprechenden Maschinenkonstantenwerte:

$$\begin{array}{ll} \text{Overflow threshold} & = 1.79769313486231571\text{E}+308 \\ \text{Epsilon} & = 1.11022302462515654\text{E}-016 \end{array}$$

Die größte darstellbare Zahl liegt jetzt bei  $1.8 \times 10^{308}$ . Dies erscheint für die meisten Zwecke mehr als ausreichend, da viele für die Naturwissenschaften typischen Zahlenwerte bereits unterhalb des single-precision-overflow liegen (etwa  $6.023 \times 10^{23}$ , die Anzahl Teilchen pro Mol) und nur einige oberhalb (wie  $10^{80}$ , die Anzahl von Elementarteilchen im Universum).

Interessanter als der overflow-threshold ist jedoch eigentlich  $\epsilon$ . Seine Bedeutung ist:

$$1 + \delta \quad \left\{ \begin{array}{ll} > 1 & \text{für } \delta \geq \epsilon \\ = 1 & \text{für } \delta < \epsilon \end{array} \right. \quad (533)$$

Ab dem Wert  $\epsilon$  kann der Computer also nicht mehr zwischen 1 und  $1+\epsilon$  unterscheiden. In einfacher Genauigkeit steht also nur ein Intervall von etwas mehr als 7 Größenordnungen unterscheidbarer Zahlen zur Verfügung (in etwa (aber nicht genau) den oben angegebenen signifikanten Dezimalstellen entsprechend). Für einige numerische Anwendungen ist dies

ausreichend, für viele andere jedoch nicht, was alleine die Existenz und der häufige Einsatz doppelter Genauigkeit (gerade in der Chemie) zeigt. In doppelter Genauigkeit stehen etwa 16 Größenordnungen Darstellungsspanne zur Verfügung (und entsprechend etwa so viele “Nachkommastellen”); dies reicht für die meisten normalen Anwendungen aus. Vierfache Genauigkeit ist in Spezialfällen nötig, kostet aber (wie noch höhere Genauigkeiten) mehr Rechenzeit.

Da fast alle reellen Zahlen eine unendlich lange Dezimaldarstellung haben, kann fast keine reelle Zahl exakt auf dem Computer dargestellt werden. Der zwangsläufige Abbruch dieser Darstellung heißt *Rundungsfehler* (*roundoff error*, obwohl die Darstellung i.d.R. tatsächlich abgebrochen und nicht gerundet wird).  $\epsilon$  ist also ein Maß für diesen Rundungsfehler (relativ zur Zahl 1). Allein durch diesen Fehler entstehen in jeder numerischen Rechnung Folgefehler. Daher ist es wichtig, keine Algorithmen zu verwenden, die instabil sind, deren Resultate sich durch solche Fehler also deutlich ändern oder (bei längeren Rechnungen) von diesen Fehlern sogar dominiert werden.

#### 4.6.2 numerische Differentiation

Ein in der numerischen Mathematik sehr häufig verwendetes Mittel ist die Diskretisierung bzw. die Gitterdarstellung (angesichts des vorigen Unterkapitels ist dies nur konsequent: Beliebig feine Unterteilungen sind ohnehin nicht realisierbar). Dazu betrachten wir auf der  $x$ -Achse kein analytisches Kontinuum von Werten, sondern lediglich isolierte Punkte  $\{x_i\}$ , die zur Vereinfachung äquidistant sein sollen:  $x_{i+1} - x_i = \Delta x = h$ . Notiert mit der Abkürzung  $y_i = y(x_i)$  erhalten wir dann auch die Funktion  $y = f(x)$  lediglich an isolierten Punkten  $\{y_i\}$ . Wenn wir mit diesen Punktmengen  $\{x_i\}$  und  $\{y_i\}$  numerische Berechnungen durchführen wollen, ist es unumgänglich, eine endliche Anzahl von Punkten zu verwenden (da Computer weder unendlich große Speicher haben noch unendlich viele Rechenschritte ausführen können). Gleichzeitig müssen wir in praktischen Anwendungen mit diesen diskreten Gittern immer Intervalle endlicher Ausdehnung abdecken, also können wir  $h$  nicht beliebig klein werden lassen (ganz abgesehen davon, daß alle Zahlen auf dem Computer nur mit begrenzter Genauigkeit darstellbar sind und daher benachbarte  $x$ - und  $y$ -Werte bei zu kleinem  $h$  identisch werden würden).

Nichtsdestotrotz können wir das Konzept der Taylorreihe verwenden, um auch für solche einfachen, in ihrer Genauigkeit begrenzten Gitterdarstellungen eine ganze Hierarchie praktisch verwendbarer Näherungsformeln für erste und höhere Ableitungen aufzustellen. Dazu betrachten wir als erstes Beispiel die Taylorreihe der Funktion  $y = f(x)$ , entwickelt am Punkt  $x_i$  und betrachtet am Nachbarpunkt  $x_{i+1}$ :

$$y_{i+1} = y(x_{i+1}) = y_i + hy'_i + \frac{h^2}{2}y''_i + \dots \quad (534)$$

Bei Konvergenz dieser Reihe und bei hinreichend kleinem Punktabstand  $h$  können wir in guter Näherung bereits das Reihenglied 2. Ordnung in  $h$  vernachlässigen:

$$y_{i+1} \approx y_i + hy'_i \quad (535)$$

(Dabei machen wir einen Reihenabbruchfehler (*truncation error*), formal zu unterscheiden vom obigen Rundungsfehler.) Auflösen von Gl. 535 nach  $y'_i$  liefert:

$$y'_i \approx \frac{y_{i+1} - y_i}{h} \quad (536)$$

Dieses Resultat erlaubt uns, die erste Ableitung von  $y = f(x)$  zumindest näherungsweise durch die rechte Seite von Gl. 536 zu ersetzen. Elementar wichtig ist dabei, daß auf der rechten Seite lediglich Funktionswerte an wenigen diskreten Stellen der  $x$ -Achse benötigt werden, also tatsächlich keinerlei Kenntnis der Ableitungsfunktion  $y' = f'(x)$  selber nötig ist, ebensowenig wie die Fähigkeit, die Funktion  $y = f(x)$  an beliebigen und ggf. beliebig dicht nebeneinander liegenden Stellen berechnen zu können. Gl. 536 ist daher auch dann einsetzbar, wenn z.B. der funktionale Zusammenhang  $f(x)$  gar nicht bekannt ist, sondern die  $y$ -Werte Resultate eines Experiments (oder einer aufwendigen numerischen Rechnung) sind, das so langwierig oder teuer ist, daß es nur für wenige isolierte  $x$ -Eingabewerte durchführbar ist.

Diese Gl. 536 ist offenbar nichts anderes als unsere ursprüngliche Definition des Differentialquotienten (erste Ableitung) als Limes des Differenzenquotienten Gl. 346, wobei hier aber der Limes nicht ausgeführt wird, sondern lediglich die Forderung eines hinreichend kleinen  $h$ -Werts verbleibt und der damit gekoppelte Status einer Näherung. Solche Formeln heißen daher auch *Finite-Differenzen-Formeln*. Die hier gegebene Herleitung über die Taylorreihe hat jedoch zwei Vorteile gegenüber einem solchen naiven Ersatz des Differentialquotienten durch den Differenzenquotienten: Sie ermöglicht Abschätzungen des Fehlers (auch ohne genauere Betrachtung können wir hier einen Fehler der Ordnung  $\mathcal{O}(h^2)$  erwarten, entsprechend der Ordnung des ersten vernachlässigten Glieds der Taylorreihe) und analoge Konstruktionen weiterer Formeln dieser Art: sowohl Formeln für die erste Ableitung mit besserer Fehlerordnung als auch Formeln für höhere Ableitungen.

Als weiteres Beispiel sei gezeigt, wie wir in analoger Weise die einfachste Finite-Differenzen-Näherungsformel für die zweite Ableitung erhalten können. Dazu betrachten wir zusätzlich zur Taylorreihe von Gl. 534 auch den sehr ähnlichen Ausdruck für diese Taylorreihe um denselben Entwicklungspunkt  $x_i$ , aber betrachtet am anderen Nachbarpunkt  $x_{i-1}$ . Vom Entwicklungspunkt  $x_i$  machen wir diesmal also nicht einen Schritt  $+h$  vorwärts, sondern einen Schritt  $-h$  rückwärts. Daher lautet dieser Taylorreihenausdruck:

$$y_{i-1} = y_i - hy'_i + \frac{h^2}{2}y''_i + \dots \quad (537)$$

Nach Addition der Gln. 534 und 537 ergibt sich mit einem Fehler 3. Ordnung in  $h$  folgende Näherung für die zweite Ableitung:

$$y''_i = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2} + \mathcal{O}(h^3) \quad (538)$$

Diese und viele weitere Finite-Differenzen-Formeln eröffnen außerdem eine Möglichkeit, Differentialgleichungen in Differenzengleichungen umzuformen und so einer effizienten numerischen Behandlung zugänglich zu machen (siehe MfC2).

Die bereits erwähnte direkte Verwandtschaft solcher Finite-Differenzen-Formeln (wie etwa Gl. 536) mit der Definition als Limes eines Differenzenquotienten für  $h \rightarrow 0$  (siehe Gl. 346) zeigt jedoch auch, daß wir hier ein prinzipielles Genauigkeitsproblem haben, da wir, wie oben diskutiert, den Limes  $h \rightarrow 0$  in der numerischen Praxis nicht erreichen können. Darüber hinaus müssen wir in Formeln wie Gl. 536 und 538 durch die wechselnden Vorzeichen letztlich immer Differenzen unterschiedlicher  $y$ -Werte bilden. Gerade bei immer kleinerem  $h$  liegen diese  $y$ -Werte jedoch immer dichter beieinander. Wir bilden also bei einem solchen Vorgehen Differenzen von Zahlen sehr ähnlicher Größe. Da die Zahlendarstellung auf dem Computer aber immer von begrenzter Genauigkeit ist, verstärken wir dabei tendenziell

das „numerische Rauschen“ in den letzten Dezimalstellen der Darstellung. Dies hat zwei Folgen: Die eine, praktische Folgerung ist, daß wir die Schrittweite  $h$  zwar einerseits so klein wie möglich machen wollen, um den Fehler durch Abbruch der Taylorreihe so klein wie möglich zu halten, daß es aber andererseits auch möglich ist,  $h$  soweit *zu klein* zu machen, daß die Differenzen von Zahlen gleicher Größenordnung kleiner werden als die Schwelle des numerischen Rauschens (bei eben dieser Größenordnung). Also gibt es tatsächlich ein zu beiden Seiten begrenztes Fenster für praktisch geeignete Größen von  $h$ .

Die zweite (allgemein-abstrakte) Folgerung ist, daß trotz weiterer möglicher Raffinessen die numerische Differentiation eine inhärent problematische (instabile) Angelegenheit bleibt (in diametralem Gegensatz zur numerischen Integration, wie wir in Abschnitt 5.12 sehen werden). Gleichzeitig ist die analytische Ableitung nicht nur exakt, sondern mit den Methoden von Abschnitt 4.2 auch vergleichsweise einfach ermittelbar. Sobald die Ableitungsfunktion  $y' = f'(x)$  analytisch ermittelbar ist, ist daher ihre numerische Auswertung in aller Regel ihrer numerischen Approximation durch Gleichungen der in diesem Abschnitt gezeigten Art vorzuziehen.

In zweiten Teil der Vorlesung (MfC2) werden wir sehen, daß Ableitungen numerisch auch noch auf anderen Wegen erzeugt werden können, z.B. mit Hilfe der Fouriertransformation, was sich als erheblich effizienter und robuster erweist.

## 4.7 komplexe Zahlen und Funktionen

komplexe Taylorreihe, daraus Definition komplexer Funktionen; insbes.: Herleitung Eulersche Formel

Ausblick „Funktionentheorie“ (komplexe Funktionen komplexer Zahlen)

## 4.8 Numerische Suche nach Nullstellen und Extrema

### 4.8.1 Suche nach Nullstellen

Das Stichwort „Nullstellensuche“ klingt zunächst relativ speziell. In seiner einfachsten Interpretation besteht die Aufgabe tatsächlich nur darin, Nullstellen einer Funktion einer Variablen zu finden, also  $x$ -Werte, die die Forderung erfüllen:

$$f(x) = 0 \quad (539)$$

(was in der Praxis bereits eine sehr wichtige Anwendung darstellt). Tatsächlich umfaßt dieselbe Aufgabenstellung aber auch andere Interpretationen, wie etwa das Auflösen von Gleichungen nach einer Unbekannten (alternativ betrachtet: das Aufsuchen von Schnittpunkt(en) zweier Funktionen):

$$f(x) = c \quad \Rightarrow \quad f(x) - c = 0 \quad (540)$$

$$f(x) = g(x) \quad \Rightarrow \quad f(x) - g(x) = 0 \quad (541)$$

was numerisch auch dann Resultate liefern kann, wenn es analytisch (mit Papier und Bleistift) nicht möglich ist. Eine weitere mögliche Anwendung ist das Anfertigen einer

Wertetabelle (oder einer Graphik) einer impliziten Funktion. Zum Beispiel definiert die Beziehung

$$\exp(-x^2 - y^2) = x^2y + y^2x^3 \quad (542)$$

implizit eine Funktion  $y = f(x)$ . In der Form

$$\exp(-x^2 - y^2) - x^2y - y^2x^3 = 0 \quad (543)$$

kann man für beliebig vorgegebene Werte  $x$  durch numerische Nullstellensuche den  $y$ -Wert finden, der zu  $y = f(x)$  gehört, unabhängig davon, ob Gl. 542 nach  $y$  auflösbar ist oder nicht.

Für das Problem  $f(x) = 0$  gibt es verschiedene, relativ robuste und allgemeine Verfahren, die aber iterativ sind und auch scheitern können. Daher ist eine numerische Lösung nur sinnvoll, wenn eine analytische Lösung nicht möglich ist (Auflösen von  $f(x)$  und ggf.  $g(x)$  nach  $x$ ).

### Nullstellen eingrenzen (bracketing)

Der *Zwischenwertsatz* der Differentiation besagt: Eine im Intervall  $[a, b]$  stetige Funktion  $y = f(x)$  (s. Abschnitt 4.1 zur Bestimmung, Bedeutung und Häufigkeit von Stetigkeit!) nimmt jeden zwischen  $f(a)$  und  $f(b)$  gelegenen Wert mindestens einmal im Intervall  $[a, b]$  an. Als unmittelbare Folge davon gilt dieser Spezialfall: Ist  $f(a) \cdot f(b) \leq 0$  (mit anderen Worten: haben  $f(a)$  und  $f(b)$  verschiedene Vorzeichen oder ist mindestens einer der beiden Werte Null), so hat die in  $[a, b]$  stetige Funktion  $y = f(x)$  mindestens eine Nullstelle in diesem Intervall  $[a, b]$ .

Verschiedene numerische Praxisverfahren (Bisektion, regula falsi, Sekantenverfahren, nicht jedoch das Newtonsche Tangentenverfahren) zur Nullstellensuche bestehen aus zwei Phasen:

1. Ermittlung (durch Raten, Vorinformation, etc.) eines beliebig großen, beliebig gelegenen Intervalls  $[a, b]$ , das nach dem Zwischenwertsatz die Existenz wenigstens einer Nullstelle innerhalb des Intervalls garantiert,
2. systematische Verkleinerung dieses Intervalls zur genaueren Eingrenzung der Nullstelle, bis zur gewünschten numerischen Genauigkeit in der Bestimmung der tatsächlichen Nullstelle.

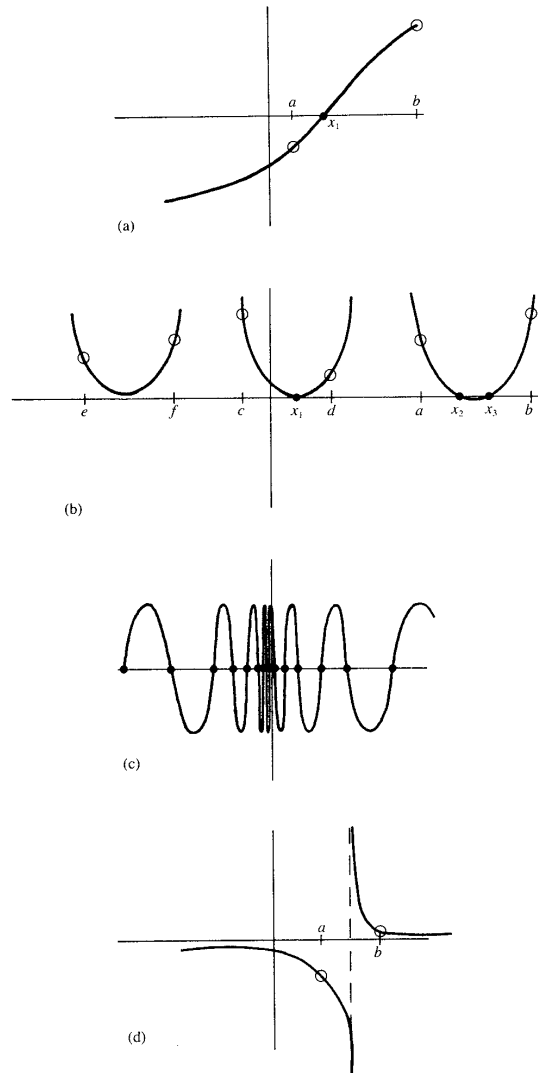
Die erste Phase besteht also aus folgendem einfachen Rezept:

$$\text{Finde } [a, b], \text{ so daß : } \text{sign}\{f(a)\} \neq \text{sign}\{f(b)\} \quad (544)$$

Tatsächlich gibt es aber mehrere einfache Möglichkeiten, wie dieses Rezept scheitern kann, z.B.:

- mehrfache oder eng benachbarte Nullstellen: Vorzeichenwechsel nicht vorhanden oder schwer lokalisierbar;
- Polstellen können Gl.544 erfüllen, ohne daß eine Nullstelle vorhanden ist.

Die Eingrenzung kann also auch scheitern. Hier ist es offensichtlich hilfreich, mit analytischen Methoden Aussagen über die Stetigkeit der Funktion machen zu können. Die folgende Graphik zeigt außer der einfachen Standardsituation (Teilbild (a)) mehrere Situationen, in denen eine Eingrenzung schwierig wird:



Wenn jedoch einmal eine gültige Eingrenzung vorliegt, ist sie sehr hilfreich, da sie eine Existenzgarantie für eine Lösung liefert. Wenn nachfolgende Schritte, die die Lösung genauer bestimmen, das eingrenzende Intervall erhalten, kann die Lösung nicht „verlorengehen“, d.h. wir haben einen Algorithmus mit Erfolgsgarantie. Dies ist insbesondere dann interessant, wenn der Algorithmus in Phase 2 auch divergentes Verhalten zeigen kann. Wie wir weiter unten sehen werden, ist das gerade beim Newtonschen Tangentenverfahren eine reale Möglichkeit. Obwohl dieses Verfahren in seiner Grundform keinerlei Eingrenzung der Nullstelle benötigt, kann das Hinzufügen einer solchen Eingrenzung also trotzdem hilfreich sein, um Divergenzen zu erkennen und zu reparieren.

## Bisektion

Nachdem in Phase 1 ein Intervall ermittelt wurde, das nach dem Zwischenwertsatz eine Nullstelle enthält, kann dieses Intervall nach folgendem Schema auf sehr einfache Weise sukzessive verkleinert werden, um die eingegrenzte Nullstelle sicher und beliebig genau finden:

1. Gegeben sei ein eingrenzendes Intervall  $[a, b]$ , so daß  $\text{sign}\{f(a)\} \neq \text{sign}\{f(b)\}$



2. Halbiere das Intervall:  $c = a + (b - a)/2$
3. Berechne  $f(c)$
4. Ersetze entweder  $a$  oder  $b$  durch  $c$ , sodaß  $[a, c]$  bzw.  $[c, b]$  wieder ein eingrenzendes Intervall ist
5. Wenn  $\epsilon = b - a$  oder  $f(c)$  kleiner ist als eine gewünschte Toleranz, stop.
6. Sonst: Gehe zu (2)

Dieses Verfahren ist zwar extrem einfach, funktioniert aber garantiert. Genauer gesagt, was auch immer den Vorzeichenwechsel verursacht (eine Nullstelle oder, nach der obigen Diskussion, eine Unstetigkeitsstelle), wird gefunden. Wegen der Einfachheit des Verfahrens ist die Konvergenz hin zu dieser Stelle nicht nur sehr gleichmäßig, sondern sogar a priori berechenbar: Wenn die Nullstelle bei der  $n$ -ten Iteration in einem Intervall der Breite  $\epsilon_n$  war, wird sie bei der  $(n + 1)$ -ten Iteration in einem halb so breiten Intervall sein:

$$\epsilon_{n+1} = \epsilon_n/2 \quad (545)$$

Daher ist die für eine gewünschte Endtoleranz  $\epsilon_f$  nötige Anzahl  $n$  von Iterationen bei einer gegebenen Anfangsintervallbreite  $\epsilon_0$  im voraus angebbar:

$$n = \log_2 \frac{\epsilon_0}{\epsilon_f} \quad (546)$$

Mehr als 40 Iterationen sind in der Praxis kaum nötig, weil  $2^{-40} \approx 10^{-12}$ .

Die Konvergenz des Bisektionsverfahrens ist allerdings nur linear und damit langsamer als bei den weiter unten vorgestellten Verfahren. Trotzdem ist pro Iteration genau eine Funktionsauswertung nötig. Wenn die Funktionsauswertung rechnerisch oder zeitlich aufwendig ist, können sich bessere Verfahren also lohnen, auch wenn dabei u.U. die Konvergenzgarantie verlorengehen kann.

### Sekantenmethode, regula falsi (false position method)

In der engeren Umgebung einer Nullstelle kann die Funktion durch eine Taylorreihe approximiert werden, die bereits nach dem linearen Term abgebrochen wird. Ersetzen wir die 1. Ableitung (Differentialquotient, Tangente) im linearen Term durch eine einfache numerische Approximation daran (Differenzenquotient, Sekante), erhalten wir diese beiden Methoden:

1. Gegeben sei ein eingrenzendes Intervall  $[a, b]$ , so daß  $\text{sign}\{f(a)\} \neq \text{sign}\{f(b)\}$
2. Konstruiere die Gerade  $g(x)$  durch die beiden Punkte  $(a, f(a))$  und  $(b, f(b))$
3. Ermittle  $c$  als Nullstelle dieser Geraden:  $g(c) = 0$
4. Berechne  $f(c)$
5. Alternative Ersetzungsregeln:

**regula falsi:** Ersetze entweder  $a$  oder  $b$  durch  $c$ , sodaß  $[a, c]$  bzw.  $[c, b]$  wieder ein eingrenzendes Intervall ist

**Sekantenmethode:** Ersetze den älteren der beiden Punkte  $a$  und  $b$  durch  $c$ .

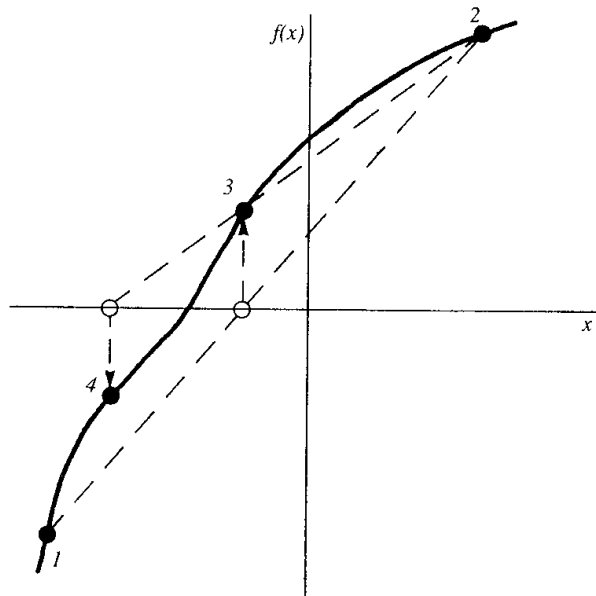
6. Wenn  $\epsilon = b - a$  oder  $f(c)$  kleiner ist als eine gewünschte Toleranz, stop.
7. Sonst: Gehe zu (2)

Unterschied: Bei der regula falsi bleibt die Nullstelle strikt eingegrenzt (wie bei Bisektion), bei der Sekantenmethode nicht; daher kann die Sekantenmethode versagen. Dafür konvergiert die Sekantenmethode schneller und in vorhersagbarer Weise:

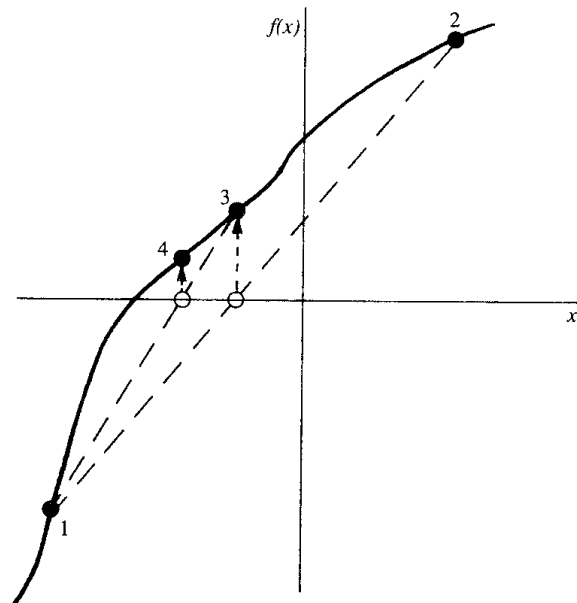
$$\lim_{k \rightarrow \infty} |\epsilon_{k+1}| \propto |\epsilon_k|^\varphi \quad (547)$$

mit dem goldenen Schnitt  $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2 \approx 1.618$ . Dies ist offensichtlich besser als linear ( $\varphi = 1$ ); da pro Iteration wiederum genau eine Funktionsauswertung nötig ist, sind diese Verfahren in der Regel effizienter als die Bisektion.

Sekantenmethode:



regula falsi:



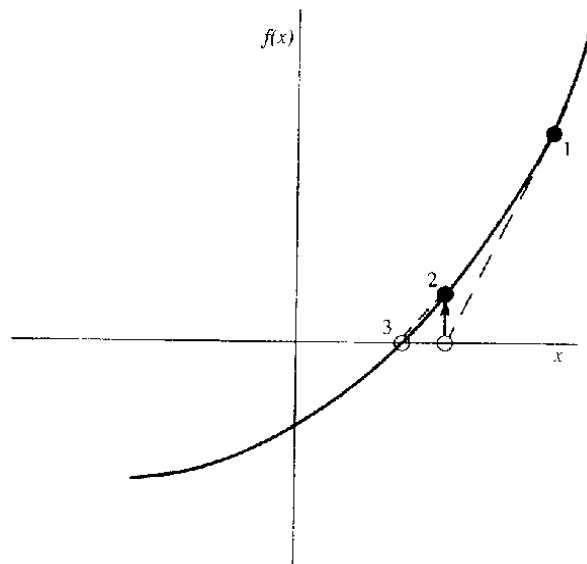
## Newton-Raphson

Wenn die 1. Ableitung von  $f(x)$  analytisch zur Verfügung steht, kann man statt lokaler Sekantenapproximationen auch die Tangente verwenden, um eine neue Approximation an die Nullstelle zu konstruieren. Da man für die Sekante zwei Punkte braucht, aber für die Tangente nur einen (und die Steigung), kommt man dann auch ganz ohne Intervallschachtelungen aus:

1. Rate einen Startpunkt  $x_i, i = 1$
2. Berechne  $f(x_i)$  und  $f'(x_i)$
3. Approximiere die Funktion lokal durch die Tangente, d.h. die nächste Approximation für die Nullstelle ist die Nullstelle der Geraden durch den Punkt  $(x_i, f(x_i))$  mit der Steigung  $f'(x_i)$ . Die Endformel dafür ist:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)} \quad (548)$$

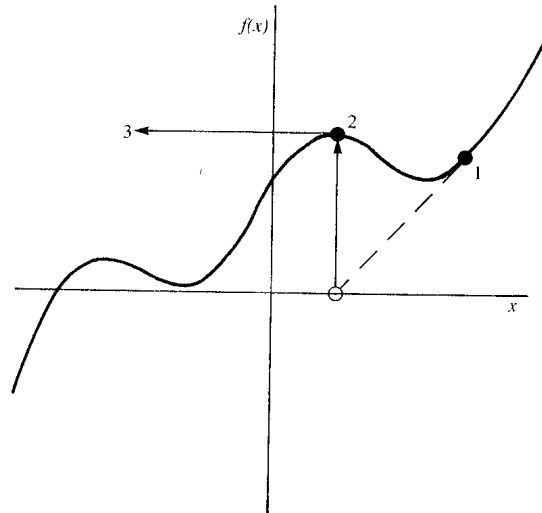
4. Wenn die Schrittweite  $\text{abs}(x_{i+1} - x_i)$  oder der Funktionswert  $f(x_{i+1})$  kleiner ist als eine Toleranzgrenze, stop.
5. Sonst  $i \leftarrow i + 1$
6. Gehe zu (2).



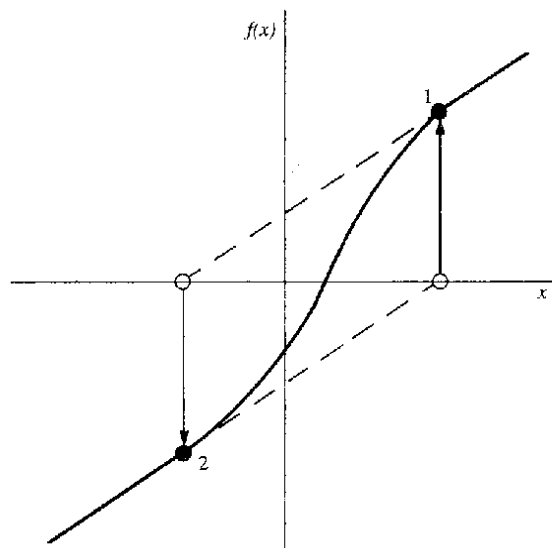
Pro Iterationsschritt brauchen wir hier zusätzlich zur Funktionsberechnung auch noch eine Ableitungsberechnung. Wenn diese Ableitung nicht analytisch zur Verfügung steht, sondern numerisch approximiert werden müßte (finite Differenzen), ist es daher besser, regula falsi oder das Sekantenverfahren zu verwenden, die ja bereits eine Finite-Differenzen-Approximation an die Ableitung beinhalten (zwar nur mit der einfachsten Formel aus dem linearen Term der Taylorreihe, aber dafür auch nur mit einer einzigen Funktionsberechnung pro Iteration).

Der größte Vorteil des Newton-Raphson-Verfahrens ist seine schnelle, theoretisch *quadratische* Konvergenz. Zudem ist kein Anfangsintervall nötig, sondern nur ein einzelner (geratener oder aus Vorinformation erhaltener) Startwert. Das Fehlen eines eingrenzenden Intervalls ist jedoch nicht unbedingt nur von Vorteil. Tatsächlich kann die Tangentenextrapolation auch spektakulär schiefgehen, wie die folgenden Bilder zeigen. In der gezeigten Grundform des Algorithmus gibt es dann keine Möglichkeit, die Nullstellenapproximation in einem eingrenzenden Intervall zu halten oder das problematische Verhalten ohne weiteren Aufwand auch nur zu diagnostizieren.

Fehler im Newton-Verfahren: Divergenz:



Fehler im Newton-Verfahren: Oszillation:



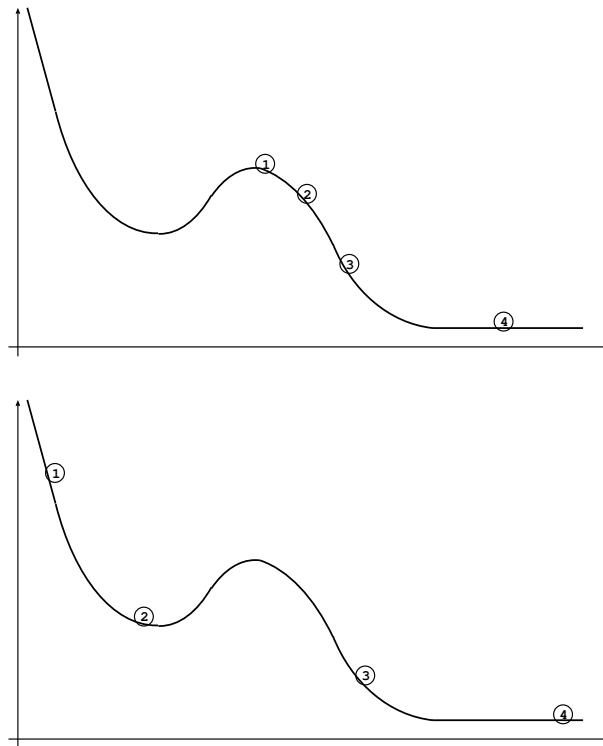
### 4.8.2 Suche nach Extremwerten

Maximierung von  $f(x)$  ist Minimierung von  $-f(x)$ , daher ist im folgenden immer nur von Minimierung die Rede.

Zur Eingrenzung von Minima braucht man nicht zwei, sondern drei Punkte:

Die stetige Funktion  $f(x)$  hat im Intervall  $[a, b]$  mit  $a < c < b$  ein Minimum, wenn  $f(c) < f(a)$  und  $f(c) < f(b)$ .

Die drei Punkte  $a, b, c$  sind jedoch im Prinzip leichter zu finden als bei der Nullstellensuche: Die banale Vorschrift „gehe abwärts (ggf. in immer größeren Schritten), bis die Funktion wieder ansteigt“, ist sehr oft erfolgreich, wenn auch nicht immer: 2 Beispiele für Fehlersituationen:



### Intervallschachtelung nach dem goldenen Schnitt

Dieses Verfahren ist eine Erweiterung der Bisektion bei der Nullstellensuche:

1. Gegeben sei ein Intervall  $[a, b]$  und ein weiterer Punkt  $c$ , die ein Minimum eingrenzen (s.o.).
2. Konstruiere einen neuen Punkt  $d$  im größeren der beiden Intervalle  $[a, c]$  bzw.  $[c, b]$  (dies sei z.B.  $[c, b]$ ), sodaß
  - $d$  im größeren der beiden Intervalle (hier:  $[c, b]$ ) liegt
  - und zwar von  $c$  aus gesehen um die Strecke  $w \times (b - c)$  in dieses Intervall hinein, mit  $w = (3 - \sqrt{5})/2$

(dadurch erreicht man eine über die sukzessiven Intervallschachtelungen skaleninvariant optimale Unterteilung, siehe Numerical Recipes)

3. Abbruch, wenn die Punkte  $c, d$  ausreichend dicht beieinander liegen; beste Approximation ans Minimum: der kleinere der beiden Werte  $f(c), f(d)$ . Sonst:
4. Wähle aus den jetzt vier Punkten  $a, c, d, b$  ein neues Triplett von Punkten, sodaß das neue Triplett das mit den niedrigst möglichen Funktionswerten ist und gleichzeitig noch das Minimum eingrenzt.
5. Gehe zu (2).

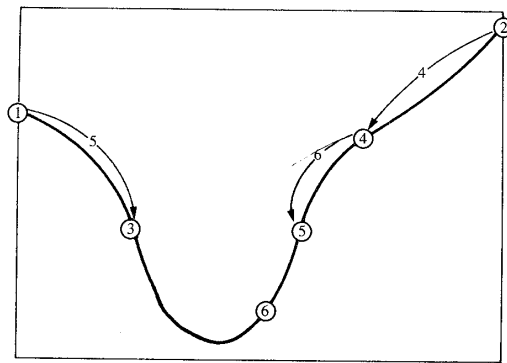


Figure 10.1.1. Successive bracketing of a minimum. The minimum is originally bracketed by points 1,3,2. The function is evaluated at 4, which replaces 2; then at 5, which replaces 1; then at 6, which replaces 4. The rule at each stage is to keep a center point that is lower than the two outside points. After the steps shown, the minimum is bracketed by points 3,6,5.

Das jeweils nächste Intervall ist hier 0.61803 mal so breit wie das vorige; dieser Wert ist nicht ganz so gut wie das Verhältnis 0.5 bei der Bisektion, in beiden Fällen spricht man jedoch von linearer Konvergenz. Wie bei der Bisektion braucht man auch hier nur eine Funktionsauswertung pro Iteration.

### Inverse parabolische Interpolation

Ähnlich wie eine Funktion in der Nähe einer Nullstelle näherungsweise linear ist, ist eine Funktion in der Nähe eines Minimums näherungsweise parabolisch. Das Pendant zu den Sekantenmethoden ist daher die inverse parabolische Interpolation:

1. Gegeben sei ein Intervall  $[a, b]$  und ein weiterer Punkt  $c$ , die ein Minimum eingrenzen (s.o.).
2. Konstruiere eine Parabel durch  $a, c, b$ ; der neue Punkt  $d$  ergibt das Minimum dieser Parabel und ist explizit gegeben durch:

$$d = b - \frac{1}{2} \frac{(b-a)^2[f(b) - f(c)] - (b-c)^2[f(b) - f(a)]}{(b-a)[f(b) - f(c)] - (b-c)[f(b) - f(a)]} \quad (549)$$

3. Abbruch, wenn die Punkte  $c, d$  ausreichend dicht beieinander liegen; beste Approximation ans Minimum: der kleinere der beiden Werte  $f(c), f(d)$ . Sonst:
4. Wähle aus den jetzt vier Punkten  $a, c, d, b$  ein neues Triplett von Punkten, sodaß das neue Triplett das mit den niedrigst möglichen Funktionswerten ist und gleichzeitig noch das Minimum eingrenzt.

5. Gehe zu (2).

Problematisch dabei ist, daß Gl.549 genauso gut zu einem Maximum wie zu einem Minimum führen kann und natürlich versagt, wenn die Funktionsform stark von einer Parabel abweicht.

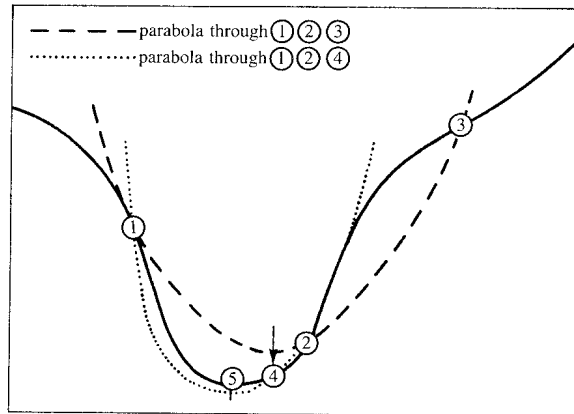


Figure 10.2.1. Convergence to a minimum by inverse parabolic interpolation. A parabola (dashed line) is drawn through the three original points 1,2,3 on the given function (solid line). The function is evaluated at the parabola's minimum, 4, which replaces point 3. A new parabola (dotted line) is drawn through points 1,4,2. The minimum of this parabola is at 5, which is close to the minimum of the function.

Ein robusteres Praxisverfahren ist daher die **Minimierung nach Brent**, bei der je nach Erfolg Schritte gemäß inverser parabolischer Interpolation bzw. gemäß goldenem Schnitt eingesetzt werden.

Verfahren dieser und ähnlicher Art können durch Informationen über die erste Ableitung der zu minimierenden Funktion in unterschiedlicher Weise ergänzt werden. Möglich sind dabei Strategien zwischen folgenden Extremen:

- *konservativ*: nur zur Entscheidung, ob ein neuer Punkt  $d$  in  $[a, c]$  oder in  $[c, b]$  liegen sollte (und ggf. zur Konvergenzüberprüfung: im Minimum sollte die erste Ableitung natürlich Null sein);
- *aggressiv*: Konstruktion von interpolierenden Polynomen höherer Ordnung, unter Verwendung von Funktions- und Ableitungsinformation einiger alter Punkte.

Welche Strategierichtung erfolgreicher und effizienter ist, hängt davon ab, „wie pathologisch“ die untersuchte Funktion ist. Wie oben anhand des Newton-Raphson-Verfahrens demonstriert, bedeutet weitergehende Verwendung von Ableitungsinformation implizit auch weitergehende Annahmen über den Funktionsverlauf, die aber nicht notwendigerweise korrekt sein müssen (insbesondere in größerer Entfernung von Minima), sodaß sich die Wahrscheinlichkeit numerischen Scheiterns (Divergenz) erhöht.

## 5 Integralrechnung von Funktionen einer Veränderlicher

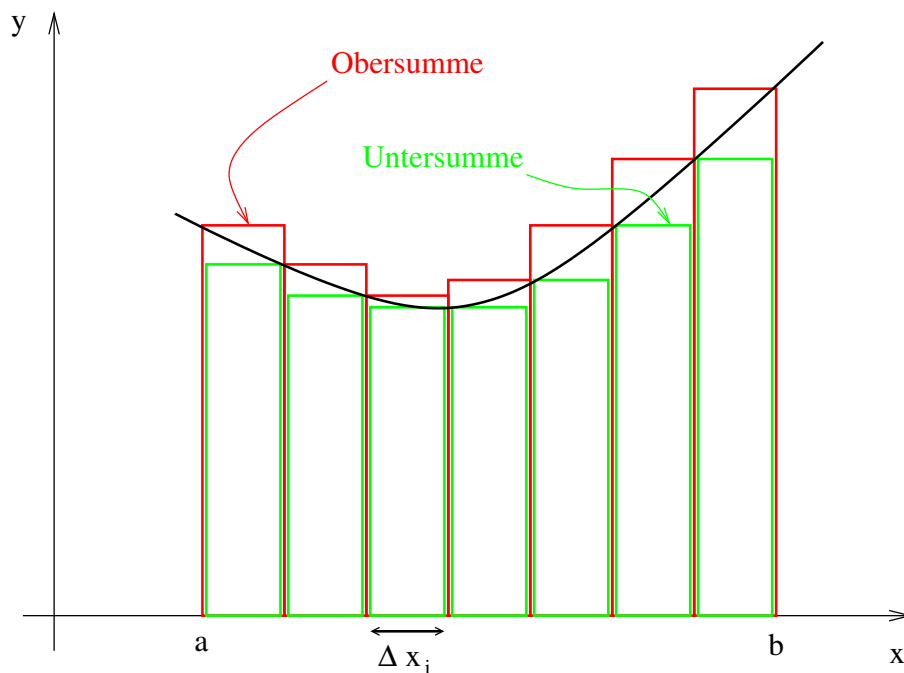
### 5.1 bestimmtes Integral

Die Fläche  $F$  zwischen einer im Intervall  $[a, b]$  stetigen Funktion  $y = f(x)$ , der  $x$ -Achse und den Geraden  $x = a$  und  $x = b$  (mit zunächst endlichen Werten  $a, b$ ; die Fälle  $a, b \rightarrow \pm\infty$  werden in Abschnitt 5.7 diskutiert) kann durch Summen von Rechtecksflächen (Riemann-Summen) approximiert werden. Je nachdem, ob die Obergrenze jedes Rechtecks durch den Minimal- oder den Maximalwert der Funktion innerhalb der jeweiligen Rechtecksbreite gegeben ist, kann man zusätzlich noch zwischen der Untersumme  $\underline{S}$  und der Obersumme  $\overline{S}$  unterscheiden:

$$\underline{S} = \sum_{i=1}^n \Delta x_i \min(f(\zeta_i)) \quad (550)$$

$$\overline{S} = \sum_{i=1}^n \Delta x_i \max(f(\zeta_i)) \quad (551)$$

Dabei ist  $\Delta x_i$  die Breite des  $i$ -ten Intervalls und  $\zeta_i$  ein  $x$ -Wert im  $i$ -ten Intervall.



Eine im Intervall  $[a, b]$  stetige Funktion  $y = f(x)$  heißt (Riemann-)integrierbar, wenn durch Verfeinerung der Rechteckszerlegungen die Differenz zwischen  $\underline{S}$  und  $\overline{S}$  beliebig klein gemacht werden kann. Der durch diesen Prozeß definierte Grenzwert heißt (Riemannsches) bestimmtes Integral und ist ein exaktes Maß für den Flächeninhalt  $F$ :

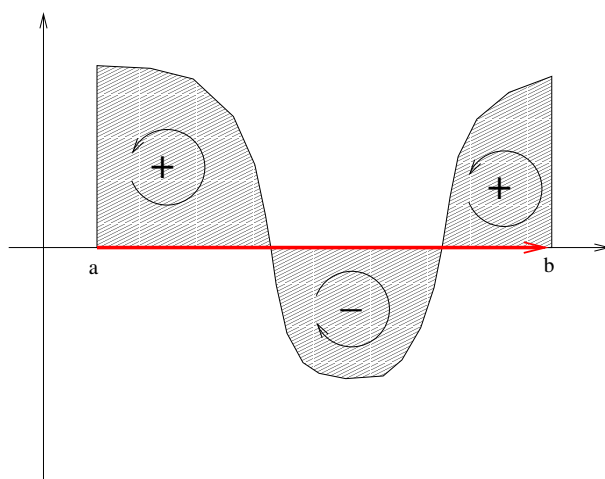
$$\lim_{n \rightarrow \infty} \underline{S} = \lim_{n \rightarrow \infty} \overline{S} = \int_a^b f(x) dx = F \quad (552)$$

Der Wert  $a$  ist die Untergrenze und der Wert  $b$  die Obergrenze.  $f(x)$  in Gl. 552 (also das „Argument“ des Integrals) heißt Integrand. Das explizit mit notierte Differential  $dx$  kann

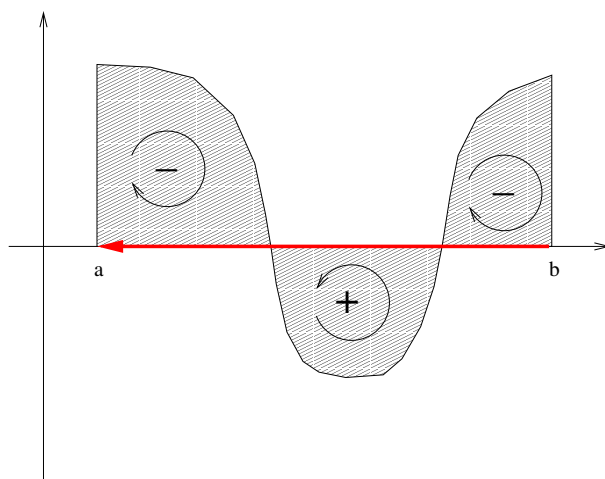


erstens als Überbleibsel von  $\Delta x$  in den Gln. 550,551 verstanden werden (offensichtlich ist  $\lim_{n \rightarrow \infty}$  in Gl. 552 bei fest vorgegebenen Werten  $a, b$  äquivalent zu  $\lim_{\Delta x \rightarrow 0}$ ). Zweitens erinnert  $dx$  daran, über welche Variable (von später ggf. auch mehreren) integriert wird. Es sei darauf hingewiesen, daß das Resultat des bestimmten Integrals eine einfache Zahl ist (nicht etwa eine Funktion von  $x$ , anders als beim unbestimmten Integral in Abschnitt 5.2), d.h. die Integrationsvariable „verschwindet“ bei der bestimmten Integration, weshalb sie beliebig umbenannt werden kann, ohne daß sich der Wert des bestimmten Integrals ändert (die Integrationsvariable ist ein „dummy index“, genauso wie der Summationsindex einer Summe). Und schließlich erweist sich das explizite Mitführen von  $dx$  bei der Transformation von Integralen durch Variablensubstitution in Abschnitt 5.4 als geradezu unverzichtbar.

Weiterhin ist zu beachten, daß die via Integration berechneten Flächeninhalte vorzeichenbehaftet sind: Wenn  $a < b$  ist und von der Untergrenze  $a$  zur Obergrenze  $b$  integriert wird, zählen Flächenstücke unterhalb der  $x$ -Achse negativ, da dort in den Gln. 550,551  $\Delta x_i > 0$  aber  $f(\zeta_i) < 0$  ist.



Wenn  $a < b$  ist und von der Untergrenze  $b$  zur Obergrenze  $a$  integriert wird (also „in Gegenrichtung von rechts nach links“), zählen Flächenstücke oberhalb der  $x$ -Achse negativ, da dort in den Gln. 550,551  $\Delta x_i < 0$  aber  $f(\zeta_i) > 0$  ist.



In beiden Fällen ist es irrelevant, ob die Werte  $a$  und/oder  $b$  positiv oder negativ sind.

Aus dieser Umkehr der Flächenvorzeichen bei Umkehr der Integrationsrichtung folgt unmittelbar, daß sich das Vorzeichen des bestimmten Integrals umkehrt, wenn seine Unter- und Obergrenze vertauscht werden:

$$\int_a^b f(x) dx = - \int_b^a f(x) dx \quad (553)$$

Im Spezialfall  $a = b$  ergibt sich daraus:

$$\int_a^a f(x) dx = 0 \quad (554)$$

Beides gilt für beliebige (integrierbare) Funktionen  $f(x)$ .

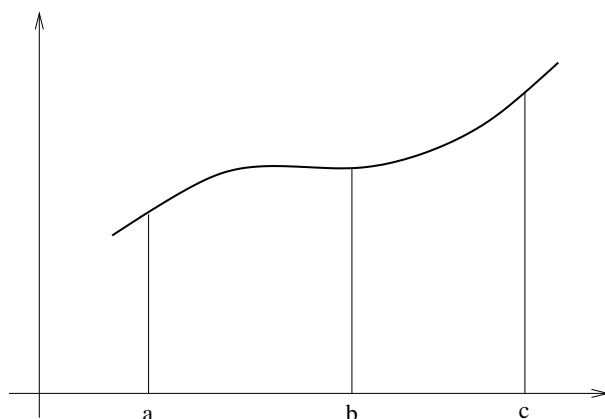
Für jede *ungerade* Funktion  $f(x)$  und jedes bestimmte Integral dieser Funktion in einem beliebigen, zum Ursprung symmetrischen Intervall  $[-a, +a]$  (inkl.  $a = \infty$ ) gilt offensichtlich (unter Benutzung von Gl. 556 vom nachfolgenden Absatz und mit der Substitution  $\tilde{x} = -x$ , siehe Abschnitt 5.4):

$$\int_{-a}^{+a} f(x) dx = \int_{-a}^0 f(x) dx + \int_0^{+a} f(x) dx = - \int_0^{+a} f(\tilde{x}) d\tilde{x} + \int_0^{+a} f(x) dx = -A + A = 0 \quad (555)$$

wobei im letzten Schritt ausgenutzt wurde, daß der Wert eines bestimmten Integrals von der Bezeichnung der Integrationsvariablen (hier  $x$  bzw.  $\tilde{x}$ ) unabhängig ist. Da die Überprüfung, ob ein Integrand ungerade ist, im allgemeinen einfach ist, kann man mit dieser Einsicht in der Praxis häufig die Berechnung derartiger Integrale völlig vermeiden. Solche Symmetrieargumente zur Feststellung, ob ein bestimmtes Integral Null ist oder nicht, sind auch die Grundlage zur Herleitung von Auswahlregeln in der Molekülspektroskopie.

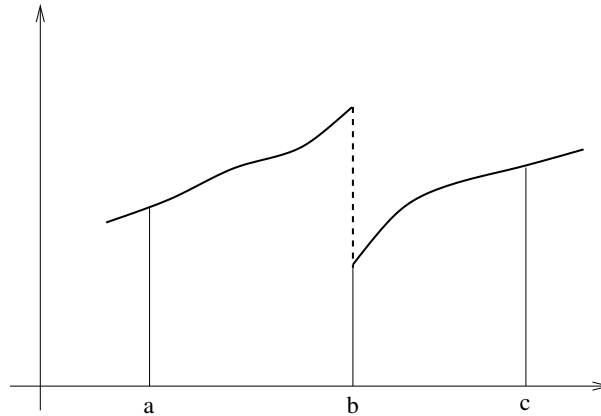
Aus der anschaulichen Additivität von Flächeninhalten folgt die Additivität von bestimmten Integralen bezüglich der Integrationsgrenzen:

$$\int_a^b f(x) dx + \int_b^c f(x) dx = \int_a^c f(x) dx \quad (556)$$



Wegen der oben diskutierten Vorzeichenänderung gilt Gl. 556 für völlig beliebige Lagen von  $a, b, c$  auf dem Zahlenstrahl (nicht nur für  $a \leq b \leq c$ , wie das Bild suggerieren mag).

Eine Umkehrung der Interpretation von Gl. 556 ermöglicht die Integration von lediglich abschnittsweise stetigen Funktionen  $f(x)$  (solange  $f(x)$  endlich bleibt, also Integration trotz endlicher Sprungstellen im Integranden) durch Zerlegung in Teilintegrale in den jeweils stetigen Abschnitten, z.B.:



$$F = \int_a^b f(x) dx + \lim_{d \rightarrow b+} \int_d^c f(x) dx \quad (557)$$

Man beachte, daß in dieser Situation das Gesamtintegral von  $a$  bis  $c$ , also  $\int_a^c f(x) dx$  mit naiver Integration über die Sprungstelle hinweg streng genommen nicht definiert ist (siehe auch die Stetigkeitsvoraussetzung beim ersten Hauptsatz in Abschnitt 5.2!). Das wird anschaulich klar durch Rekurs auf die Approximation durch Unter- bzw. Obersumme: Diese Approximationen versagen offensichtlich völlig, solange die Sprungstelle nicht zufällig auf der Grenze zwischen zwei Rechtecken liegt. Eine solche naive Integration über endliche Sprungstellen hinweg ist also zu vermeiden; stattdessen ist eine Zerlegung analog zu Gl. 557 vorzunehmen. Unendliche Sprungstellen werden in Abschnitt 5.7 behandelt.

Ebenfalls durch Rückblick auf die Definition mit Unter- und Obersumme wird anschaulich klar, daß bestimmte Integrale additiv und linear bezüglich des Integranden sind:

$$\int_a^b (\alpha f(x) \pm \beta g(x)) dx = \alpha \int_a^b f(x) dx \pm \beta \int_a^b g(x) dx \quad (558)$$

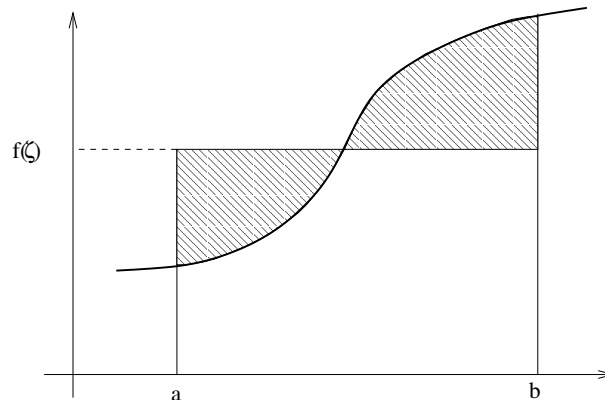
Für  $\alpha = \beta = 1$  und das Minuszeichen liefert Gl. 558 eine Vorschrift zur Berechnung der Fläche zwischen den beiden Kurven  $f(x)$  und  $g(x)$ .

Als weiteres Hilfsmittel sei schließlich noch der *Mittelwertsatz der Integralrechnung* erwähnt: Ist  $y = f(x)$  in  $[a, b]$  stetig, so existiert ein  $\zeta \in [a, b]$ , für das gilt

$$\int_a^b f(x) dx = f(\zeta) (b - a) \quad (559)$$

$f(\zeta)$  heißt Mittelwert von  $y = f(x)$  im Intervall  $[a, b]$ . Das bestimmte Integral über  $f(x)$ , das den Inhalt einer Fläche mit einem gekrümmten Rand darstellt, kann also ersetzt

werden durch eine Rechtecksfläche, wobei die eine Kantenlänge gegeben ist durch einen geeigneten Mittelwert von  $f(x)$  in diesem Intervall. Dieser Satz ist in der einfachsten Situation anschaulich unmittelbar klar:



Er kann aber auch leicht bewiesen werden: Sicherlich gilt

$$f(\zeta_{\min})(b-a) \leq \int_a^b f(x) dx \leq f(\zeta_{\max})(b-a) \quad (560)$$

wobei  $f(\zeta_{\min, \max})$  der Minimal- bzw. Maximalwert von  $f(x)$  im Intervall  $[a, b]$  ist. Da die Funktion  $f(x)$  in diesem Intervall stetig ist, muß sie nach dem Zwischenwertsatz (s.S.88) jeden Wert zwischen  $f(\zeta_{\min})$  und  $f(\zeta_{\max})$  mindestens einmal annehmen, insbesondere also auch den Wert  $f(\zeta)$ , für den Gl. 559 gilt.

## 5.2 Stammfunktion, unbestimmtes Integral, Hauptsätze

Der *erste Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung* besagt: Ist  $y = f(x)$  in  $[a, b]$  definiert und stetig, so existiert in  $[a, b]$  eine Funktion

$$F(x) = \int_{x_0}^x f(t) dt \quad (561)$$

mit  $x_0, x \in [a, b]$ . Diese Funktion ist differenzierbar, und ihre Ableitung ist wieder die ursprüngliche Funktion  $f(x)$ :

$$\frac{dF(x)}{dx} = f(x) \quad (562)$$

Der erste Hauptsatz zeigt also, daß Integration und Differentiation zueinander inverse Operationen sind (wie z.B. Addition und Subtraktion).

Wir können mit unseren Mitteln Gl. 562 leicht beweisen: Per Definition ist die Ableitung der Limes des Differenzenquotienten:

$$\frac{dF(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{F(x + \Delta x) - F(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\int_{x_0}^{x+\Delta x} f(t) dt - \int_{x_0}^x f(t) dt}{\Delta x} = \dots \quad (563)$$

Im zweiten Schritt wurde dabei die Definition der Funktion  $F(x)$  aus Gl. 561 eingesetzt. Der Zähler des letzten Quotienten kann durch Subtraktion der Teilintegrale (siehe Additivität bzgl. der Integrationsgrenzen, Gl. 556) vereinfacht werden; das verbleibende Integral läßt sich mit Hilfe des Mittelwertsatzes (Gl. 559) eliminieren:

$$\dots = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\int_x^{x+\Delta x} f(t) dt}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(\zeta)\Delta x}{\Delta x} = \lim_{\zeta \rightarrow x} f(\zeta) = f(x) \quad (564)$$

Dabei wurde im vorletzten Schritt ausgenutzt, daß bei  $\Delta x \rightarrow 0$  auch  $\zeta \rightarrow x$  geht, wegen  $\zeta \in [x, x + \Delta x]$ . Im letzten Schritt wurde die Stetigkeit von  $f(x)$  verwendet.

Über den Beleg hinaus, daß die Integration die Umkehrung der Differentiation ist, garantiert Gl. 561 die Existenz einer zur stetigen Funktion  $f(x)$  gehörigen „neuen“ Funktion  $F(x)$ , deren Ableitung die Funktion  $f(x)$  ist. Eine solche Funktion  $F(x)$  nennen wir *Stammfunktion* von  $f(x)$ . Natürlich kann  $F(x)$  eine bereits bekannte Funktion sein; tatsächlich wurden aber viele Funktionen erst als Stammfunktionen von anderen Funktionen „entdeckt“; die Abschnitte 5.7 und 5.8 zeigen einige Beispiele dafür.

Wegen der Summenregel der Differentiation (Gl. 357) und des Verschwindens von Konstanten bei Ableitung (Gl. 382) gilt genaugenommen in Erweiterung von Gl. 562

$$\frac{d}{dx}(F(x) + C) = f(x) \quad (565)$$

für beliebige sogenannte *Integrationskonstanten*  $C \in \mathbb{R}$ . Zu  $f(x)$  gibt es also nicht nur eine Stammfunktion, sondern immer mindestens eine einparametrische Kurvenschar von Stammfunktionen. Als Abkürzung führen wir daher das *unbestimmte Integral* ein, symbolisch geschrieben als

$$\int f(x) dx \quad (566)$$

Es bezeichnet die Menge aller Stammfunktionen, d.h. alle Funktionen, für die gilt

$$\frac{d}{dx} \left( \int f(x) dx \right) = f(x) \quad (567)$$

Auf S. 69 hatten wir gezeigt, daß sich bei Ableitung die Symmetrie einer Funktion umkehrt (von gerade zu ungerade, bzw. umgekehrt). Da nach dem ersten Hauptsatz die Integration die Umkehrung der Differentiation ist, bewirkt auch die Integration eine Symmetrienumkehr, d.h. die Stammfunktion einer geraden Funktion ist eine ungerade Funktion und umgekehrt. Dies könnten wir auch anhand der elementaren Integrationsregeln zeigen, ähnlich zur Demonstration in den Gln. 435 bis 440.

Der *zweite Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung* liefert eine einfache Vorschrift zur Berechnung eines bestimmten Integrals von  $f(x)$  auf  $[a, b]$  aus der Stammfunktion  $F(x)$ :

$$\int_a^b f(x) dx = [F(x)]_a^b = F(b) - F(a) \quad (568)$$

Dabei ist der mittlere Ausdruck eine hier eingeführte Abkürzung für den rechten Ausdruck. Für spätere Verwendung notieren wir am Rande, daß wir diese Situation formal auch

folgendermaßen schreiben könnten:

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b F'(x) dx = \int_a^b dF \quad (569)$$

wobei im letzten Schritt die Identität  $F'(x) dx = dF$  ausgenutzt wurde (s. Gl. 562).

Dieser zweite Hauptsatz ist leicht zu beweisen, unter Zuhilfenahme des ersten Hauptsatzes sowie (wiederum) der Vorzeichenumkehr bei Grenzenvertauschung und der Additivität bzgl. Integrationsgrenzen:

$$F(b) - F(a) = \int_{x_0}^b f(t) dt - \int_{x_0}^a f(t) dt = \int_{x_0}^b f(t) dt + \int_a^{x_0} f(t) dt = \int_a^b f(x) dx \quad (570)$$

Der zweite Hauptsatz mag auf den ersten Blick etwas banal aussehen. Auf den zweiten Blick leistet er jedoch etwas Unerwartetes: Zur Berechnung des Integrals  $\int_a^b f(x) dx$  benötigen wir laut der Herleitung aus Unter- und Obersumme Informationen über den Integranden im gesamten Integrationsintervall  $[a, b]$  (und tatsächlich gehen wir bei numerischer Integration ja genau so vor!). Der zweite Hauptsatz zeigt jedoch, daß wir das bestimmte Integral auch ganz anders berechnen können: Sobald wir die zum Integranden  $f(x)$  gehörige Stammfunktion  $F(x)$  konstruiert haben, brauchen wir von dieser Stammfunktion nur noch Information an den beiden Intervallgrenzen  $a$  und  $b$  selber, also (scheinbar) keinerlei Informationen dazwischen. Damit erweist sich der zweite Hauptsatz als „kleiner Bruder“ der berühmten Integralsätze von Green, Gauß und Stokes, die für Funktionen mehrerer Variabler Analoges leisten, also ein Integral über ein ganzes (mehrdimensionales) Gebiet ersetzen durch ein Integral lediglich über den Rand dieses Gebiets, auf Kosten des mehrdimensionalen Pendants zur Stammfunktionsbildung (siehe MfC2 für weitere Details).

### 5.3 Integration elementarer Funktionen

Aufgrund des ersten Hauptsatzes lassen sich die in Abschnitt 4.2.3 (s.S.63) hergeleiteten Ableitungen elementarer Funktionen einfach umkehren und liefern die folgende Liste von *Grundintegralen* (wobei  $C \in \mathbb{R}$  jeweils die in Gl. 565 eingeführte Integrationskonstante ist):

$$\int 0 dx = C \quad (571)$$

$$\int dx = \int 1 dx = x + C \quad (572)$$

(Man beachte den Unterschied zwischen Gl. 571 und Gl. 572!) Die beiden vorigen Gln. 571 und Gl. 572 können auch als Spezialfall der folgenden Gl. 573 aufgefaßt werden, für  $x = 0$  und  $\alpha > 0$  bzw. für  $\alpha = 0$  und beliebiges  $x$ :

$$\int x^\alpha dx = \frac{x^{\alpha+1}}{\alpha+1} + C \quad \text{für } \alpha \neq -1 \quad (573)$$

Hier muß der Fall  $\alpha = -1$  ausgeschlossen werden, weil sonst auf der rechten Seite im Nenner eine Division durch Null entsteht. Der Fall  $\alpha = -1$  entspricht folgendem Grundintegral:

$$\int \frac{1}{x} dx = \ln |x| + C \quad (574)$$

Hier mögen die Betragsstriche zunächst etwas sonderbar aussehen, zumal wir bisher die Umkehrung dieses Sachverhalts, also  $\frac{d}{dx} \ln x = 1/x$ , auch ohne Betragsstriche geschrieben hatten. Dies bedarf einiger Kommentare: Der erste Hauptsatz definiert uns via  $\int_{x_0}^x f(t) dt$  (Gl. 561) eine zunächst unbekannte Funktion  $F(x)$ , von der wir nur wissen, daß  $\frac{d}{dx} F(x) = f(x)$  gelten soll. Für  $f(x) = 1/x$  nennen wir diese Funktion  $F(x) = \ln x$ , mit der Konvention  $x_0 = 1$  („normaler“ wäre  $x_0 = 0$ , aber das geht hier natürlich nicht, da  $x = 0$  eine Polstelle von  $1/x$  ist). Weil  $e^x$  die Umkehrfunktion von  $\ln x$  ist und für alle  $x \in ]-\infty, +\infty[$  gilt  $a^x > 0$  (inkl.  $a = e$ ), war es bisher sinnvoll, sich für die Betrachtungsrichtung  $\frac{d}{dx} \ln x = 1/x$  auf den Bereich  $x > 0$  zu beschränken.

Der Integrand  $1/x$  in Gl. 574 ist aber nicht nur für  $x > 0$  definiert, sondern auch für  $x < 0$  (wenn auch nicht für  $x = 0$ ). Und der erste Hauptsatz besagt, daß  $F(x)$  auf  $\mathbb{R}/0$  definiert ist, wenn  $f(x)$  auf  $\mathbb{R}/0$  definiert ist. Tatsächlich ist  $\ln|x|$  die korrekte Erweiterung von  $\ln x$  auf diesen Definitionsbereich. Gl. 574 ist nämlich der Spezialfall  $f(x) = x$ ,  $f'(x) = 1$  der folgenden Umkehrung der sogenannten „logarithmischen Ableitung“:

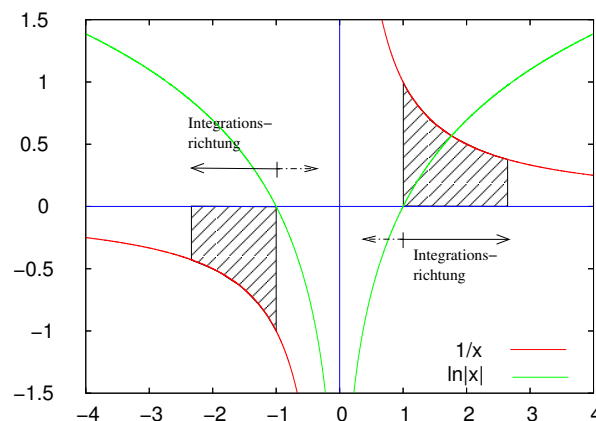
$$\int \frac{f'(x)}{f(x)} dx = \ln |f(x)| + C \quad (575)$$

Aufgrund des ersten Hauptsatzes ist diese Beziehung bewiesen, sobald wir gezeigt haben, daß der Integrand  $f'(x)/f(x)$  die Ableitung von  $\ln |f(x)|$  ist, was sich mit Hilfe der Kettenregel leicht beweisen läßt:

$$\text{für } f(x) > 0 : \frac{d}{dx} \ln |f(x)| = \frac{d}{dx} \ln f(x) = \frac{1}{f(x)} f'(x) = \frac{f'(x)}{f(x)} \quad (576)$$

$$\text{für } f(x) < 0 : \frac{d}{dx} \ln |f(x)| = \frac{d}{dx} \ln(-f(x)) = \frac{1}{-f(x)} (-f'(x)) = \frac{f'(x)}{f(x)} \quad (577)$$

Gl. 574 sieht in graphischer Veranschaulichung folgendermaßen aus:



Die für positive und negative  $x$ -Werte entgegengesetzten Integrationsrichtungen könnten dabei verwirrend erscheinen; dies ist jedoch beim gewöhnlichen Fall  $x_0 = 0$  ganz genauso. Wie in Abschnitt 5.7 diskutiert wird, müssen wir hier strikt vermeiden, über den Ursprung hinweg zu integrieren, weil wir sonst einen unendlich großen Flächeninhalt (divergentes Integral) erhalten würden. Tatsächlich ist das Integral von  $-1$  bis  $-x$  die korrekte Schreibweise für negative  $x$ -Werte, wie sich formal durch die Substitution  $s = -t$ ,  $ds = -dt$  mit  $t = -1 \Rightarrow s = 1$  und  $t = -x \Rightarrow s = x$  zeigen läßt:

$$\int_{-1}^{-x} \frac{1}{t} dt = \int_1^x \frac{-1}{-s} ds = \int_1^x \frac{1}{s} ds \quad (578)$$

Zu beachten ist schließlich noch, daß  $1/x$  eine ungerade Funktion ist, aber  $\ln|x|$  eine gerade. Aber auch dieser Wechsel der Symmetrie bei Integration (bzw. Ableitung) ist keine Besonderheit, sondern der Normalfall, wie man allgemein beweisen kann. Tatsächlich ist es auch anschaulich klar aus der vorzeichenbehafteten Flächeneigenschaft des Integrals und dem oben genannten Wechsel der Integrationsrichtung und begegnet uns auch bei anderen Funktions-/Stammfunktionspaaren immer wieder, wie etwa bei  $\sin x$  und  $\cos x$  oder bei  $x$  und  $x^2/2$ .

Weitere Grundintegrale unter Beteiligung transzendenter Funktionen sind:

$$\int \sin x \, dx = -\cos x + C \quad (579)$$

$$\int \cos x \, dx = \sin x + C \quad (580)$$

$$\int e^x \, dx = e^x + C \quad (581)$$

$$\int \frac{dx}{\cos^2 x} = \tan x + C \quad (582)$$

$$\int \frac{dx}{\sin^2 x} = -\cot x + C \quad (583)$$

Das folgende Integral muß nicht als Grundintegral im eigentlichen Sinne betrachtet werden (Umkehrung einer Ableitung, die ihrerseits direkt aus der Definition des Differentialquotienten herzuleiten ist), sondern auch kann mit Variablensubstitution bestimmt werden (siehe Abschnitt 5.4):

$$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \arcsin x + C = -\arccos x + \tilde{C} \quad \text{für } |x| < 1 \quad (584)$$

$$\int \frac{dx}{1+x^2} = \arctan x + C = -\operatorname{arccot} x + \tilde{C} \quad (585)$$

Als Abschluß dieser Liste sei noch angeführt:

$$\int \ln x \, dx = x \ln x - x + C \quad (586)$$

Die Gültigkeit von Gl. 586 ergibt sich nach dem ersten Hauptsatz aus folgender Ableitung (unter Verwendung von Summen- und Produktregel):

$$\frac{d}{dx}(x \ln x - x) = \ln x + x \frac{1}{x} - 1 = \ln x \quad (587)$$

Gl. 586 kann jedoch auch mit partieller Integration ermittelt werden (s. Abschnitt 5.4).

Wie bereits auf S. 69 bemerkt, fällt bei dieser Liste der Grundintegrale die Tendenz auf, daß viele Stammfunktionen  $F(x)$  in der Hierarchie der Funktionenklassen „schwieriger“ sind als ihre zugrundeliegenden Funktionen  $f(x)$  (siehe etwa der Übergang von gebrochen rationalen Funktionen zu transzendenten Funktionen bei den Gln. 574 und 585 oder der Übergang von einer algebraischen Funktion zu einer transzendenten bei Gl. 584). Dadurch ist die Integration prinzipiell komplizierter als die Differentiation: Auch bei scheinbar einfachen Integranden kann die Integration deshalb scheitern, weil eine neue transzendente



Funktion entsteht, die wir bisher noch nicht kannten. Das heißt nichts anderes, als daß wir nicht in der Lage sind, einen analytischen Ausdruck für diese neue Funktion hinzuschreiben (zusammengesetzt aus Potenzen und schon bekannten transzendenten Funktionen von  $x$ , verknüpft durch normale Rechenoperationen). Und das heißt wiederum, daß ein solcher Ausdruck auch nicht durch noch so raffinierte Anwendung irgendwelcher Integrationsregeln gefunden werden kann; in diesem Sinne kann es also keinen umfassenden Satz von Integrationsregeln geben, im Gegensatz zur Situation bei der Differentiation. Abschnitte 5.7 und 5.8 zeigen einige Beispiele für mit analytischen Methoden nicht bestimmbare Integrale, die neue transzendente Funktionen definieren. (Es sei noch einmal betont, daß außer bei Polstellen und pathologischen Integranden die Schwierigkeit bei der Integration in der Regel *nicht* darin liegt, daß das Integral gar nicht existiert könnte. Diese Existenz wird meist durch den ersten Hauptsatz gesichert.)

## 5.4 Integrationsregeln

Der erste Hauptsatz der Differentiation und Integration liefert nicht nur die in Abschnitt 5.3 aufgezählten Grundintegrale, sondern erlaubt auch die Aufstellung von Integrationsregeln, in Umkehrung unserer Differentiationsregeln. Wie jedoch in Abschnitt 5.3 auf S. 106 erläutert, sind diese Integrationsregeln aus prinzipiellen Gründen weniger umfassend erfolgreich als die Differentiationsregeln, auf denen sie beruhen. Während ein rein systematisches Vorgehen bei Ableitungen in der Regel zum Erfolg führt, ist daher bei der Behandlung von Integralen in größerem Maße auch Intuition und Raten wichtig.

### 5.4.1 Integration durch Substitution

In geeigneten Fällen kann ein Integral dadurch bestimmt werden, daß der Integrand durch Übergang zu einer neuen Variablen (Substitution) vereinfacht wird. Dies ist formal die Umkehrung der Kettenregel der Differentiation.

Im zunächst vorliegenden Integral

$$F(x) = \int_{x_0}^x f(t) dt \quad (588)$$

sei der Integrand  $f(t)$  kompliziert und/oder nicht direkt zu integrieren (also kein Grundintegral, s. Abschnitt 5.3). Wir führen nun folgende Substitution durch:

$$t = \phi(u) \quad , \quad \frac{dt}{du} = \phi'(u) \quad \Leftrightarrow \quad dt = \phi'(u) du \quad (589)$$

In analoger Weise sind auch die Integralgrenzen zu transformieren:

$$\phi(v_0) = x_0, \quad \phi(v) = x \quad \Rightarrow \quad v_0 = \phi^{-1}(x_0), \quad v = \phi^{-1}(x) \quad (590)$$

Damit können wir Gl. 588 in folgender Form schreiben:

$$F(v) = \int_{v_0}^v f[\phi(u)] \phi'(u) du \quad (591)$$

Wie in dieser etwas abstrakten Notation ersichtlich, ist der Integrand in Gl. 591 nicht in jedem Fall einfacher integrierbar als in Gl. 588. Tatsächlich ergibt sich eine Vereinfachung nur in Spezialfällen. Der wohl wichtigste Fall ist der folgende: Integrale des Typs

$$\int g[f(x)] f'(x) dx \quad (592)$$

lassen sich durch die Substitution

$$u = f(x) \quad , \quad \frac{du}{dx} = f'(x) \quad \Leftrightarrow \quad du = f'(x) dx \quad (593)$$

auf folgende Form bringen:

$$\int g(u) du \quad (594)$$

In dieser allgemeinen Notation scheint das Integral in Zeile 594 tatsächlich einfacher zu sein als das in Zeile 592. Obwohl das im konkreten Fall nicht notwendigerweise richtig sein muß, treten jedoch in einigen typischen Fällen Vereinfachungen auf, wie im folgenden anhand einiger allgemeiner Schemata und dazugehöriger Beispiele gezeigt werden soll:

Bei folgendem generellen Schema ist eine Vereinfachung durch Substitution zu erwarten:

$$\int [f(x)]^n f'(x) dx = \int u^n du = \frac{u^{n+1}}{n+1} + C = \frac{[f(x)]^{n+1}}{n+1} + \tilde{C} \quad , \quad \text{für } n \neq -1 \quad (595)$$

Dabei wurde im ersten Schritt die Substitution Gl. 593 eingesetzt, die zum einfachen Grundintegral Gl. 573 führt. Im letzten Schritt wurde die Substitution rückgängig gemacht.

Einfache Beispiele für dieses Schema: ♣ siehe Vorlesung

Das Schema von Gl. 595 gilt nur für  $n \neq -1$ . Das offensichtliche Pendant für den Fall  $n = -1$  ist unser zweites Schema:

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)} dx = \int \frac{du}{u} = \ln |u| + C = \ln |f(x)| + \tilde{C} \quad (596)$$

Dabei wurde wiederum im ersten Schritt die Substitution Gl. 593 eingesetzt, die hier zum einfachen Grundintegral Gl. 574 führt. Im letzten Schritt wurde die Substitution rückgängig gemacht. Das Resultat ist offensichtlich dasselbe wie das bereits in Abschnitt 5.3 auf S. 104 mit Gl. 575 gezeigte, was dort in umgekehrter Richtung bewiesen wurde.

Einfache Beispiele für dieses Schema: ♣ siehe Vorlesung

Häufig nützlich ist auch dieses dritte Schema:

$$\int [e^{f(x)}]^n f'(x) dx = \int [e^u]^n du = \frac{1}{n} \int e^v dv = \frac{1}{n} e^v + C = \frac{1}{n} e^{nf(x)} + C \quad (597)$$

Auch hier wurde im ersten Schritt die Substitution Gl. 593 eingesetzt sowie anschließend eine weitere Substitution mit  $v = nu$ ,  $dv = n du$ , gefolgt vom Grundintegral Gl. 581 und von zwei Rücksubstitutionen.

Einfache Beispiele für dieses Schema: ♣ siehe Vorlesung

Offensichtlich lassen sich in analoger Weise einige weitere generelle Schemata für erfolgreiche Integration durch Substitution aufstellen, worauf hier jedoch verzichtet werden soll.

Stattdessen wollen wir ein Beispiel für die Behandlung der Integralgrenzen bei der Substitution nachtragen. Als Beispiel verwenden wir das Integral Gl. 584

$$\int_0^{1/2} \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \dots \quad (598)$$

das wir hier durch folgende (nicht unmittelbar naheliegende) Substitution bearbeiten wollen:

$$x = \sin u \quad , \quad dx = \cos u \, du \quad (599)$$

Eine Strategie zur Behandlung der Grenzen ist es, diese zunächst zu ignorieren und erst nach der Rücksubstitution wieder explizit anzuführen: Unter Verwendung der Substitution Gl. 599 erhalten wir so aus Gl. 598 zunächst:

$$\dots = \int_{\square}^{\square} \frac{\cos u}{\sqrt{1-\sin^2 u}} \, du = \dots \quad (600)$$

was sich mit Hilfe von  $\cos^2 u = 1 - \sin^2 u$  als das einfache Grundintegral Gl. 572 herausstellt:

$$\dots = \int_{\square}^{\square} du = [u + C]_{\square}^{\square} = \dots \quad (601)$$

Zur Rücksubstitution brauchen wir die Umkehrung von Gl. 599:

$$u = \arcsin x \quad (602)$$

Nach dieser Rücksubstitution können wir die ursprünglichen Grenzen wieder explizit einsetzen und die Berechnung abschließen:

$$\dots = [\arcsin x]_0^{1/2} = \frac{\pi}{6} - 0 = \frac{\pi}{6} \quad (603)$$

Der alternative Weg ist, mit Hilfe von Gl. 602 die Grenzen ebenfalls zu transformieren:

$$0 = \arcsin 0 \quad , \quad \frac{\pi}{6} = \arcsin \frac{1}{2} \quad (604)$$

und in Gl. 601 einzusetzen:

$$\dots = \int_0^{\pi/6} du = [u + C]_0^{\pi/6} = \frac{\pi}{6} \quad (605)$$

Der zusätzliche Aufwand zur Transformation der Grenzen erspart offensichtlich die Rücktransformation. Insgesamt sind aber der Rechenaufwand und die durchzuführende Rechenschritte (und natürlich auch das Resultat) auf beiden Wegen gleich.

### 5.4.2 partielle Integration

Die partielle Integration (engl.: integration by parts) ist die Umkehrung der Produktregel der Differentiation. Letztere besagt:

$$(f \cdot g)' = f' \cdot g + g' \cdot f \quad (606)$$

wobei der kompliziertere Ableitungsausdruck auf der linken Seite offensichtlich in zwei einfachere Ableitungsausdrücke auf der rechten Seite transformiert wird. Integrieren wir diese Beziehung auf beiden Seiten gemäß dem ersten Hauptsatz Gl. 561, erhalten wir:

$$\int_{x_0}^x (f \cdot g)' dt = [f \cdot g]_{x_0}^x = \int_{x_0}^x (f' \cdot g) dt + \int_{x_0}^x (f \cdot g') dt \quad (607)$$

wobei im ersten Schritt zur Transformation der linken Seite der zweite Hauptsatz verwendet wurde. Da wir eigentlich eine Integrationsregel erzeugen wollen, also auf einen Ausdruck abzielen, der einen Integralausdruck durch einen anderen Ausdruck ersetzt, bringt uns Gl. 607 von links nach rechts gelesen noch nicht zu diesem Ziel. Einen solchen Ausdruck erhalten wir jedoch, wenn wir Gl. 607 nach dem letzten Term auf der rechten Seite auflösen:

$$\int_{x_0}^x (f \cdot g') dt = [f \cdot g]_{x_0}^x - \int_{x_0}^x (f' \cdot g) dt \quad (608)$$

(Offensichtlich hätten wir Gl. 607 genausogut nach dem ersten Term auf der rechten Seite auflösen können, mit einem leicht veränderten aber formal völlig analogen Resultat.) Erste Voraussetzung zur Anwendung von Gl. 608 ist, daß wir den Integranden in zwei Faktoren zerlegen können, dessen einer (hier:  $f$ ) leicht zu differenzieren ist und dessen anderer (hier:  $g$ ) leicht zu integrieren ist, sonst haben wir bereits Schwierigkeiten damit, in Gl. 608 von der linken auf die rechte Seite überzugehen. Aber selbst wenn das gegeben ist, erzeugen wir auf der rechten Seite von Gl. 608 wieder ein neues Integral.

Daher ist eine partielle Integration nicht in jedem Fall sinnvoll. Allgemein können wir die folgenden drei Fälle unterscheiden, bei denen die partielle Integration letztlich zum Erfolg führt:

- A:  $\int f g' dt$  ist ein „schwierigeres“ Integral;  $\int f' g dt$  ist ein vergleichsweise „einfacheres“ Integral, z.B. ein Grundintegral oder mit anderen Methoden (z.B. Substitution) ermittelbar;
- B:  $\int f' g dt$  ist dasselbe Integral wie  $\int f g' dt$  oder ein Vielfaches davon: Dann kann Gl. 608 nach diesem Integral aufgelöst werden, und ein Ausdruck, der  $[f \cdot g]$  enthält, liefert das Resultat;
- C:  $\int f' g dt$  entspricht im formalen Aufbau dem Integral  $\int f g' dt$ : Dann kann aus Gl. 608 eine *Rekursionsformel* konstruiert werden, die die Bestimmung des ursprünglichen Integrals ermöglicht.

Details werden aus Beispielen zu allen drei Fällen klar: ♣ siehe Vorlesung

### 5.4.3 Integration rationaler Funktionen

Wie wir in diesem Abschnitt durch explizite Konstruktion der resultierenden Integrale zeigen, läßt sich jede (gebrochen) rationale Funktionen von  $x$  geschlossen integrieren. Damit ist dies die höchste Funktionenklasse, deren Integrationserfolg wir generell garantieren(!) können. Dies bedeutet jedoch nicht, daß der angegebene Lösungsweg der beste oder auch nur immer gangbar ist: Tatsächlich kann ein solcher Lösungsversuch bereits im allerersten Schritt scheitern (Bestimmung der Nullstellen des Nennerpolynoms). Prinzipiell wichtiger ist die resultierende generelle Aussage: Bei algebraischen oder transzendenten Funktionen können wir auf unbekannte Stammfunktionen stoßen — hier jedoch nicht.

Der gerade angedeutete „Standardweg“ zur Integration einer gebrochen rationalen Funktion von  $x$  basiert auf der Zerlegung dieser Funktion in Partialbrüche. Diese wurde bereits in Abschnitt 3.1.4 erläutert. Hier zeigen wir, daß sich die resultierenden Partialbrüche erster und zweiter Ordnung immer nach einem Standardschema integrieren lassen (dies sind die sogenannten *Schlußintegrale*).

Zur Rekapitulation von Abschnitt 3.1.4 sei betont, daß die Partialbruchzerlegung nur für *echt* gebrochen rationale Funktionen gilt. Eine *unecht* gebrochen rationale Funktion läßt sich jedoch durch Polynomdivision in eine Summe eines Polynoms und einer echt gebrochen rationalen Funktion zerlegen. Also ist ggf. ein Vorbereitungsschritt durchzuführen:

**0.Schritt:** Polynomdivision der unecht gebrochen rationalen Funktion, resultierend in einem Polynom und einer echt gebrochen rationalen Funktion; *nicht vergessen:* gliedweise Integration des Polynomanteils, nach dem Grundintegral Gl. 573

Der echt gebrochen rationale Anteil  $R(x) = P_n(x)/Q_m(x)$  wird dann nach dem hier vorgestellten Rezept weiterverarbeitet.

**1.Schritt:** Zerlegung des Nennerpolynoms  $Q_m(x)$  in reelle lineare und quadratische Faktoren (Fundamentalsatz der Algebra Gl. 184, ggf. Polynomdivision Gl. 187; s.S. 31)

$$Q_m(x) = a_0(x - a)^\alpha \cdots (x^2 + bx + c)^\beta \cdots \quad (609)$$

**2.Schritt:** Zerlegung von  $R(x)$  in Partialbrüche, Gln. 201 und 203; dabei Bestimmung der  $m$  Unbekannten  $A_i, B_i, C_i$  durch Koeffizientenvergleich (Lösbarkeit des resultierenden, (inhomogenen) linearen Gleichungssystems garantiert durch Existenz der Partialbruchzerlegung)

**3.Schritt:** Integration der Partialbrüche (Schlußintegrale)

Im letzten Schritt können drei Typen von Schlußintegralen auftreten. Die ersten beiden Schlußintegraltypen sind sehr einfach, da sie selber fast Grundintegrale sind:

$$\int \frac{A}{x - a} dx = A \ln|x - a| + \text{const} \quad (610)$$

$$\int \frac{A}{(x - a)^k} dx = A \frac{(x - a)^{1-k}}{1 - k} + \text{const} \quad (611)$$

Der dritte mögliche Schlußintegraltyp (zu Partialbrüchen zweiter Art) benötigt erheblich mehr Arbeit, erweist sich aber letztlich auch als lösbar. Zur Vereinfachung zerlegen wir dieses Integral zunächst in zwei Teilintegrale  $I_1$  und  $I_2$ :

$$\int \frac{Bx + C}{(x^2 + bx + c)^k} dx = \frac{B}{2} \int \frac{2x + b}{(x^2 + bx + c)^k} dx + \left(C - \frac{Bb}{2}\right) \int \frac{dx}{(x^2 + bx + c)^k} \quad (612)$$

$$=: \frac{B}{2} \cdot I_1 + \left(C - \frac{Bb}{2}\right) \cdot I_2 \quad (613)$$

Im folgenden werden diese beiden Integrale  $I_1$  und  $I_2$  bestimmt, jeweils getrennt für die Fälle  $k = 1$  und  $k > 1$ . Diese Resultate sind dann nach Gl. 613 mit dort angeführten Vorfaktoren zu versehen und zu addieren.

Im Fall  $k = 1$  läßt sich das Integral  $I_1$  durch die Substitution  $u = x^2 + bx + c$ ,  $du = (2x + b) dx$  auf das Grundintegral Gl. 574 zurückführen. Wir erhalten als Endresultat:

$$I_1 = \ln |x^2 + bx + c| + \text{const} \quad (614)$$

Das Integral  $I_2$  ist im Fall  $k = 1$  etwas aufwendiger. Wir machen zunächst die folgende quadratische Ergänzung

$$x^2 + bx + c = \left(x + \frac{b}{2}\right)^2 + c - \frac{b^2}{4} = \left(x + \frac{b}{2}\right)^2 + d^2 \quad (615)$$

wobei eine neue Konstante  $d$  definiert wurde (es gilt  $d^2 > 0$ , da  $x^2 + bx + c = 0$  keine reelle Lösung hat; tatsächlich ist hier auch  $d$  selber als positiv annehmbar:  $d > 0$ ). Damit läßt sich  $I_2$  wie folgt umschreiben:

$$I_2 = \int \frac{dx}{\left(x + \frac{b}{2}\right)^2 + d^2} = \frac{1}{d^2} \int \frac{dx}{\left(\frac{x + \frac{b}{2}}{d}\right)^2 + 1} = \dots \quad (616)$$

Mit der Substitution  $u = (x + b/2)/d$ ,  $du = dx/d$  resultiert schließlich ein einfaches Grundintegral:

$$\dots = \frac{1}{d} \int \frac{du}{u^2 + 1} = \frac{1}{d} \arctan \left( \frac{x + \frac{b}{2}}{d} \right) + \text{const} \quad (617)$$

Im Fall  $k > 1$  läßt sich Integral  $I_1$  mit derselben Substitution bestimmen wie im Fall  $k = 1$ , mit dem Unterschied, daß hier das Grundintegral Gl. 573 resultiert. Wir erhalten als Endresultat:

$$I_1 = \frac{(x^2 + bx + c)^{1-k}}{1-k} + \text{const} \quad (618)$$

Das Integral  $I_2$  ist im Fall  $k > 1$  recht kompliziert. Wir machen dieselbe quadratische Ergänzung wie im Fall  $k = 1$ , mit der zusätzlichen Einführung einer neuen Variablen  $t$ , also der Substitution  $t = x + b/2$ ,  $dt = dx$ :

$$x^2 + bx + c = t^2 + d^2 \quad (619)$$

Partielle Integration liefert dann:

$$\underbrace{\int \frac{dt}{(t^2 + d^2)^k}}_{I_2^k} = \frac{t}{(t^2 + d^2)^k} + \int \frac{k \cdot 2t^2}{(t^2 + d^2)^{k+1}} dt = \dots \quad (620)$$

Addition von  $0 = 2k(d^2 - d^2)$  im Zähler des rechtsstehenden Integrals sowie einige sehr elementare Umformungsschritte führen zu:

$$\dots = \frac{t}{(t^2 + d^2)^k} + 2k \underbrace{\int \frac{dt}{(t^2 + d^2)^k}}_{I_2^k} - 2kd^2 \underbrace{\int \frac{dt}{(t^2 + d^2)^{k+1}}}_{I_2^{k+1}} \quad (621)$$

Auflösen nach  $I_2^{k+1}$  sowie Indextransformation  $k \rightarrow k-1$  (aus rein kosmetischen Gründen) führt schließlich zu dieser Rekursionsformel:

$$\underbrace{\int \frac{dt}{(t^2 + d^2)^k}}_{I_2^k} = \frac{1}{2(k-1)d^2} \cdot \frac{t}{(t^2 + d^2)^{k-1}} + \frac{2k-3}{2(k-1)d^2} \underbrace{\int \frac{dt}{(t^2 + d^2)^{k-1}}}_{I_2^{k-1}} \quad (622)$$

mit deren Hilfe sich Integrale  $I_2^k$  für beliebige Werte von  $k > 1$  zurückführen lassen auf

$$I_2^1 = \int \frac{dt}{t^2 + d^2} = \frac{1}{d} \arctan \frac{t}{d} + \text{const} \quad (623)$$

(was bereits oben für  $k = 1$  aufgeführt wurde).

Das konkrete Vorgehen wird an Beispielen klarer: ♣ siehe Vorlesung.

Hervorzuheben ist, daß die auf S. 111 vorgeführten Lösungswege für die Grundintegrale  $I_1$  und  $I_2$  (in beiden Fällen  $k = 1$  und  $k > 1$ ) natürlich auch anwendbar sind, wenn diese Integrale in anderen Zusammenhängen auftreten. Insbesondere die gezeigte Integration nach quadratischer Ergänzung ist ein einfacher Weg zur Lösung von Integralen rationaler Funktionen dieses Typs. Daher dazu ein weiteres, kurzes Beispiel:

Gegeben sei das Integral

$$\int \frac{dx}{x^2 - 2x + 5} = \dots \quad (624)$$

Nach quadratischer Ergänzung im Nenner erhält man:

$$\dots = \int \frac{dx}{(x-1)^2 + 4} = \dots \quad (625)$$

Mit Hilfe der Substitution  $u = x - 1, du = dx$  ergibt sich daraus:

$$\dots = \int \frac{du}{u^2 + 4} = \frac{1}{4} \int \frac{du}{\frac{u^2}{4} + 1} = \dots \quad (626)$$

Dies läßt sich mit der Substitution  $2v = u, 2dv = du$  weiter umformen zum arctan-Grundintegral, was nach Rücksubstitution die Lösung liefert:

$$\dots = \frac{1}{2} \int \frac{dv}{v^2 + 1} = \frac{1}{2} \arctan(v) + C = \frac{1}{2} \arctan\left(\frac{x-1}{2}\right) + C \quad (627)$$

#### 5.4.4 Integration rationaler Funktionen mit zusammengesetztem Argument

In Erweiterung von Abschnitt 5.4.3 lassen sich (gebrochen) rationale Funktionen in einigen Fällen auch dann integrieren, wenn das Argument der (gebrochen) rationalen Funktion

nicht  $x$  selbst ist, sondern eine (oder mehrere) Funktionen von  $x$ , wobei auch transzendente Funktionen vorkommen können. Die folgende Liste sogenannter „Standardsubstitutionen“ zeigt jeweils einen möglichen Lösungsweg auf. Dabei ist jedoch zu betonen, daß diese Substitutionen entgegen ihrem Namen in der Regel *nur* dann verwendet werden sollten, wenn kein anderer, einfacherer Lösungsweg sichtbar ist. Es handelt sich *nicht* um die Methode der Wahl für jeden dieser Fälle. Neben der Angabe einer „letzten Rettung“ dient diese Liste deshalb eher dazu zu zeigen, daß die aufgeführten Integrale prinzipiell lösbar sind und nicht etwa auf neue, bis dato noch unbekannte (transzendente) Stammfunktionen führen.

In der folgenden Liste steht  $R(\cdot)$  jeweils für eine (gebrochen) rationale Funktion des angegebenen Arguments. Zu beachten ist weiterhin, daß das Argument höchstens die jeweils angegebenen Funktionen enthalten darf, keine anderen. Zum Beispiel sollten in Fall (b) bzw. (c) tatsächlich nur  $e^x$  bzw. Winkelfunktionen von  $x$  auftreten, nicht auch  $x$  selber. In den letzten drei Fällen (d),(e),(f) ist ggf. eine quadratische Ergänzung nötig, um lineare Glieder unter der Wurzel zu eliminieren.



- Fall a)**  $\int R(x) dx$  lösbar durch Partialbruchzerlegung.
- Fall b)**  $\int R(e^x) dx$  lösbar durch  
 Substitution:  $t = e^x$ ,  $dt = e^x dx$ ,  $dx = \frac{dt}{t}$   
 $\Rightarrow \int R(t) dt$ , Fall (a)
- Fall c)**  $\int R(\sin x, \cos x, \tan x, \cot x) dx$  lösbar durch  
 Substitution:  $t = \tan x$ ,  $dx = \frac{2 dt}{1+t^2}$   
 man erhält:  $\sin x = \frac{2t}{1+t^2}$ ,  $\cos x = \frac{1-t^2}{1+t^2}$ ,  $\tan x = \frac{2t}{1-t^2}$   
 $\Rightarrow \int R(t) dt$ , Fall (a)
- Fall d)**  $\int R(x, \sqrt{a^2 - x^2}) dx$  lösbar durch  
 Substitution:  $x = a \sin t$ ,  $dx = a \cos t dt$ ,  $\sqrt{a^2 - x^2} = a \cos t$   
 $\Rightarrow \int R(\sin t, \cos t) dt$ , Fall (c)
- Fall e)**  $\int R(x, \sqrt{a^2 + x^2}) dx$  lösbar durch  
 Substitution:  $x = a \tan t$ ,  $dx = \frac{a dt}{\cos^2 t}$ ,  $\sqrt{a^2 + x^2} = \frac{a}{\cos t}$   
 $\Rightarrow \int R(\tan t, \cot t) dt$ , Fall (c)
- Fall f)**  $\int R(x, \sqrt{x^2 - a^2}) dx$  lösbar durch  
 Substitution:  $x = a \cosh t$ ,  $dx = a \sinh t dt$ ,  $\sqrt{x^2 - a^2} = a \sinh t$   
 $\Rightarrow \int R(e^t) dt$ , Fall (b)

#### 5.4.5 Integration durch Taylorentwicklung des Integranden

Das wesentliche Charakteristikum einer Taylorreihe ist, daß sie (innerhalb des Konvergenzradius) eine im Sinne der Funktionenklassenhierarchie "komplizierte" Funktion durch eine (ggf. unendliche) Summe aus sehr einfachen Funktionen (Polynomen) ersetzt. Letztere sind dann natürlich auch trivial integrierbar (Grundintegral Gl. 573). Bei Versagen anderer Möglichkeiten kann diese Idee ein guter Weg zur Berechnung von Integralen sein, liefert jedoch in der Praxis nur eine Approximation, da wir in aller Regel nur endlich viele Taylorreihenterme integrieren können.

Beispiele: siehe Vorlesung ♣

## 5.5 Formel von Stirling

Approximation von  $n!$  durch

$$\left(\frac{n}{e}\right)^n e < n! < \left(\frac{n}{e}\right)^n ne \quad (628)$$

bzw.

$$n! \approx \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi e} \quad (629)$$

Genauigkeit 1% für  $n > 10$  bzw. 0.1% für  $n > 100$ .

Herleitung: ♣

## 5.6 Integration komplexer Funktionen

Ausblick: „Funktionentheorie“ (komplexe Funktionen komplexer Zahlen)

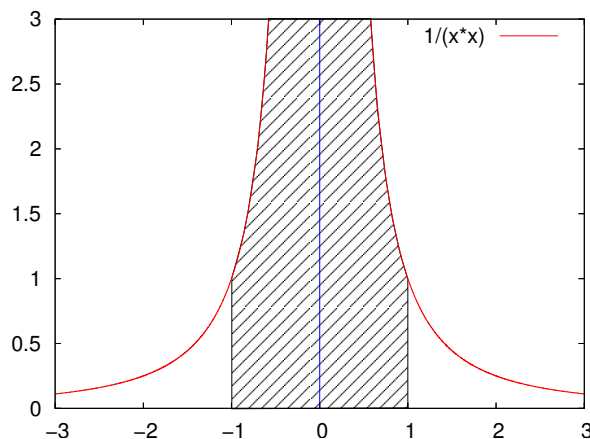
## 5.7 uneigentliche Integrale

Der Riemannsche Integralbegriff impliziert, daß der Integrand  $f(x)$  im Integrationsintervall  $[a, b]$  beschränkt ist (siehe auch Stetigkeitsvoraussetzung beim ersten Hauptsatz) und auch die Integralgrenzen selber betragsmäßig endlich bleiben. In der Praxis sind aber sowohl Integrale über Bereiche z.B. mit Polstellen interessant als auch (vor allem in der Quantenchemie) Integrale über den gesamten Raumbereich  $[-\infty, +\infty]$ . Daher betrachten wir hier auch diese scheinbar exotischeren Fälle zumindest in Kürze.

Eine naive Behandlung solcher Situationen ist falsch, wie folgendes Beispiel zeigt:

$$\int_{-1}^1 \frac{dx}{x^2} = \left[ -\frac{1}{x} \right]_{-1}^1 = -1 - 1 = -2 \quad (630)$$

Die Berechnung dieses bestimmten Integrals nach dem zweiten Hauptsatz scheint auf den ersten Blick richtig zu sein. Tatsächlich liefert sie aber ein sogar qualitativ falsches Resultat: Wie folgende Skizze zeigt, muß der Flächeninhalt auf jeden Fall positiv sein, ganz gleich, welchen Betrag er haben mag.



Der Fehler besteht darin, daß die Polstelle des Integranden bei  $x = 0$  im Integrationsintervall liegt, aber nicht beachtet wurde. Diese Polstelle widerspricht der Stetigkeitsvoraussetzung des ersten Hauptsatzes, der seinerseits wiederum Voraussetzung für die Anwendbarkeit des zweiten Hauptsatzes und damit für die Gültigkeit des Berechnungswegs in Gl. 630 ist. Abstrakt gesehen erweist sich hier die Stärke des zweiten Hauptsatzes (Verwendung von (Stamm-)Funktionsinformation lediglich an den Intervallrändern) als Schwäche. In der Praxis ist das Vorgehen nach Gl. 630 hier einfach unzulässig. Nach den bisherigen Definitionen existiert dieses Integral strenggenommen nicht.

Integrale mit unbeschränktem Integranden und/oder betragsmäßig unendlichen Grenzen heißen daher uneigentliche Integrale. Wie die beiden folgenden Abschnitte zeigen, können sie in manchen Fällen trotzdem ein endliches, definiertes Resultat liefern (dann heißt das uneigentliche Integral konvergent), in anderen Fällen aber nicht (dann divergiert das uneigentliche Integral).

### 5.7.1 Integrale mit unbeschränktem Integranden

Im Gegensatz zur bisherigen Behandlung sei hier der Integrand  $f(x)$  im Intervall  $[a, b]$  nicht beschränkt, z.B. existiere bei  $x = c$  eine Unendlichkeitsstelle:

$$\lim_{x \rightarrow c} f(x) = \pm\infty \quad , \quad \text{für } c \in [a, b] \quad (631)$$

Dann definieren wir:

$$\int_a^b f(x) dx := \lim_{\epsilon_1 \rightarrow 0+} \int_a^{c-\epsilon_1} f(x) dx + \lim_{\substack{\epsilon_2 \rightarrow 0+ \\ c+\epsilon_2}} \int_{c+\epsilon_2}^b f(x) dx \quad (632)$$

Es sei noch einmal betont, daß das Integral auf der linken Seite von Gl. 632 ohne die auf der rechten Seite gegebene, neue Definition sinnlos ist. Der erste Hauptsatz garantiert die Existenz nur bei Stetigkeit im ganzen Integrationsintervall, aber dann völlig allgemein, also für ansonsten beliebige Funktionen  $f(x)$ . Die auf der rechten Seite von Gl. 632 gegebene Definition ist weniger allgemein. Daher ist zunächst einmal jeder einzelne Fall eines unbeschränkten Integranden erneut auf Konvergenz oder Divergenz des uneigentlichen Integrals zu untersuchen.

Das folgende Beispiel zeigt, daß diese Konvergenz oder Divergenz tatsächlich von der Wahl des Integranden abhängt: Für  $\alpha \in \mathbb{R}$  mit  $\alpha \geq 0$  gilt:

$$\int_0^1 \frac{dx}{x^\alpha} \quad \text{ist} \quad \begin{cases} \text{konvergent} & \text{für } \alpha < 1 \\ \text{divergent} & \text{für } \alpha \geq 1 \end{cases} \quad (633)$$

Dies läßt sich folgendermaßen zeigen: (Da die Polstelle hier auf einem der Ränder des Integrationsintervalls liegt, genügt die Untersuchung eines einzigen Grenzwerts. Ansonsten braucht man zwei Grenzwerte, wie auf der rechten Seite von Gl. 632.) Für  $\alpha = 1$  gilt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \int_{\epsilon}^1 \frac{dx}{x^\alpha} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} [\ln |x|]_{\epsilon}^1 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} (-\ln |\epsilon|) = \infty \quad (634)$$

Für  $\alpha \neq 1$  gilt:

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \int_{\epsilon}^1 \frac{dx}{x^{\alpha}} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \left[ \frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_{\epsilon}^1 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{1}{1-\alpha} (1 - \epsilon^{1-\alpha}) = \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha} & \text{für } \alpha < 1 \\ \infty & \text{für } \alpha > 1 \end{cases} \quad (635)$$

Wenn das uneigentliche Integral konvergiert, können wir die “ganz normalen” Integrationsregeln anwenden, inklusive dem 2. Hauptsatz, z.B. hier für den Fall  $\alpha = 1/2$ :

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} = 2[\sqrt{x}]_0^1 = 2 \quad (636)$$

Dies ist genau das (richtige) Resultat, das wir in Gl. 635 mit einer sorgfältigeren Grenzwertbetrachtung hergeleitet hatten, hier für den Spezialfall  $\alpha = 1/2$ . Wenn wir sicher wissen, daß ein konvergentes Integral vorliegt, können wir also den einfacheren Lösungsweg von Gl. 636 beschreiten. Allerdings sei nochmals betont, daß dabei die Gefahr kraß falscher Resultate besteht, wenn wir Divergenzen übersehen oder falsch einschätzen, wie eingangs anhand von Gl. 630 diskutiert. Aufgrund der Eigenschaften des 2. Hauptsatzes ist klar, daß die in diesem Sinne “gefährlichen” Situationen diejenigen sind, bei denen (wie im Beispiel von Gl. 630) eine Polstelle *zwischen* den Integrationsgrenzen liegt, anderenfalls würden wir das Problem bemerken:

$$\int_0^1 \frac{dx}{x^2} = \left[ -\frac{1}{x} \right]_0^1 = -1 + \infty = \infty \quad (637)$$

### 5.7.2 Integrale mit unbeschränktem Integrationsintervall

In ähnlicher Weise erhalten bestimmte Integrale mit beschränktem Integranden aber nicht-endlichen Grenzen erst durch folgende Zusatzdefinition einen Sinn:

$$\int_a^{\infty} f(x) dx := \lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) dx \quad (638)$$

$$\int_{-\infty}^b f(x) dx := \lim_{a \rightarrow -\infty} \int_a^b f(x) dx \quad (639)$$

(Natürlich können auch diese beiden Fälle in Kombination auftreten, sowie Kombinationen mit dem vorigen Fall eines unbeschränkten Integranden. Die gegebenen Definitionen sind dann entsprechend miteinander zu kombinieren.)

Auch hier hängt die Konvergenz bzw. Divergenz dieser uneigentlichen Integrale vom Integranden ab, ist also fallweise jeweils neu zu untersuchen. Dies zeigt wiederum ein ähnliches Beispiel: Für  $\alpha \in \mathbb{R}$  mit  $\alpha \geq 0$  gilt:

$$\int_1^{\infty} \frac{dx}{x^{\alpha}} \text{ ist } \begin{cases} \text{konvergent} & \text{für } \alpha > 1 \\ \text{divergent} & \text{für } \alpha \leq 1 \end{cases} \quad (640)$$

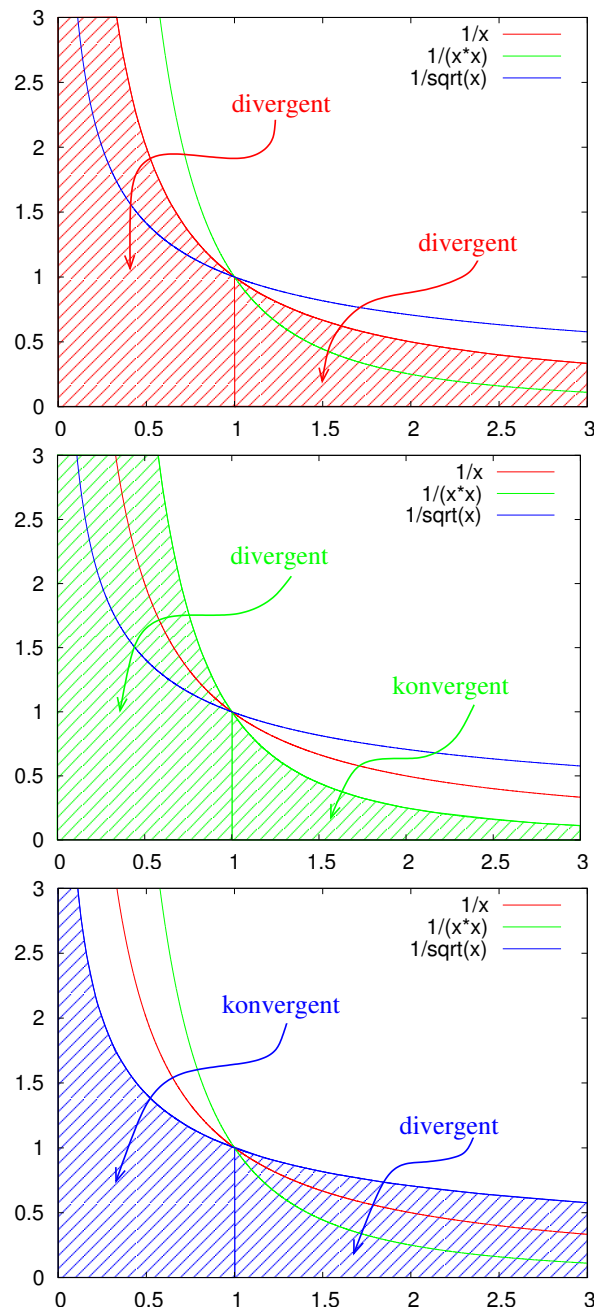
Dies läßt sich folgendermaßen zeigen: Für  $\alpha = 1$  gilt:

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_1^b \frac{dx}{x} = \lim_{b \rightarrow \infty} [\ln |x|]_1^b = \lim_{b \rightarrow \infty} (\ln |b|) = \infty \quad (641)$$

Für  $\alpha \neq 1$  gilt:

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_1^b \frac{dx}{x^\alpha} = \lim_{b \rightarrow \infty} \left[ \frac{x^{1-\alpha}}{1-\alpha} \right]_1^b = \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{1-\alpha} (b^{1-\alpha} - 1) = \begin{cases} \frac{-1}{1-\alpha} & \text{für } \alpha > 1 \\ \infty & \text{für } \alpha < 1 \end{cases} \quad (642)$$

Zusammen mit dem komplementären Beispiel des vorigen Unterabschnitts ergibt sich dadurch folgendes Bild:



(Die Lage der „Grenzlinie“ bei  $x = 1$  ist dabei offenbar letztlich willkürlich, solange sie bei einem endlichen  $x$ -Wert liegt.)

In der Quantenchemie und einigen anderen Anwendungen sind bestimmte Integrale des Typs  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$  sogar der Normalfall.  $f(x)$  hat in der Quantenchemie typischerweise die Form  $\Psi^*(x) \cdot \Psi(x)$ , mit der (komplexwertigen) Wellenfunktion  $\Psi(x)$ . Die mathematische

Forderung, daß das uneigentliche Integral  $\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx$  konvergent sein muß, bedeutet dann eine zusätzliche Beschränkung der möglichen Form der Wellenfunktion auf die Klasse der sogenannten *quadratintegrablen* Funktionen, die durch ihren Funktionsverlauf garantieren, daß das uneigentliche Integral  $\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x)\Psi(x) dx$  konvergiert, was nach dem obigen Beispiel  $1/x^\alpha$  die Auswahl möglicher Funktionsverläufe für  $\Psi(x)$  deutlich einschränkt.

## 5.8 spezielle Funktionen

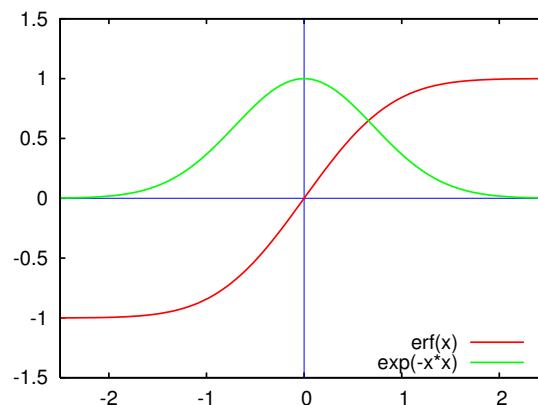
Viele Integrale mit scheinbar einfach aussehenden, stetigen Integranden sind mit allen oben genannten Mitteln nicht integrierbar. Aufgrund der Stetigkeit des Integranden garantiert der erste Hauptsatz jedoch trotzdem die Existenz einer nach Gl. 561 zu bildenden (transzendenten) „neuen“ Stammfunktion.

In ähnlicher Weise wurden „neue“ Funktionen auch als Lösungen gewisser Differentialgleichungen entdeckt, durch Rekursionsbeziehungen konstruiert, usw. Traditionell nennt man all diese Funktionen *spezielle Funktionen*, obwohl sie sich vom „gewöhnlichen“ Satz transzendenter Funktionen (wie etwa den Winkelfunktionen oder der Exponentialfunktion) im Aussehen des Funktionsgraphen oder anderen Eigenschaften nicht wesentlich unterscheiden.

Viele dieser „speziellen Funktionen“ sind gerade in naturwissenschaftlichen Anwendungen besonders wichtig und häufig. Darüber hinaus ist für die Zwecke des vorliegenden Kapitels interessant, daß man bei Integralen, die spezielle Funktionen definieren, jeder normale Integrationsversuch von vornherein sinnlos ist, da ja ansonsten gar keine Notwendigkeit bestanden hätte, für dieses Integral eine ganz neue Stammfunktion einzuführen. Daher ist es hilfreich, solche scheinbar einfachen aber in diesem Sinne „nicht integrierbaren“ Integranden zu kennen. Aus diesen Gründen werden hier einige Beispiele für solche speziellen Funktionen gezeigt.

Wegen ihres in vielen analytischen Transformationen besonders einfachen Verhaltens ist die Gaußfunktion  $\exp(-x^2)$  extrem häufig. Als Integrand führt sie jedoch auf eine „neue“ spezielle Funktion, die sogenannte *Fehlerfunktion* (engl.: error function):

$$\operatorname{erf}(x) := \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (643)$$



(Der Vorfaktor  $2/\sqrt{\pi}$  dient lediglich der „Normierung“, also dafür, daß die Fehlerfunktion asymptotisch gegen  $\pm 1$  läuft (anstelle eines anderen konstanten Werts), ist also

gewissermaßen reine Kosmetik.) Die Gaußfunktion ist gerade, die Fehlerfunktion dagegen ungerade, was wir aber bereits weiter oben als Normalfall erkannt hatten. Offensichtlich gibt es auch keinerlei andere Überraschungen im Funktionsverlauf, entgegen dem, was der Name „spezielle Funktion“ suggerieren könnte.  $\operatorname{erf}(x)$  ist also eigentlich in jeder Hinsicht genauso selbstverständlich wie  $\sin x$  oder  $\cos x$ .

Auf den ersten Blick könnte man der Meinung sein, daß völlig unklar ist, wie man  $\operatorname{erf}(x)$  zu berechnen hat. Tatsächlich ist aber auch das ähnlich klar (oder ähnlich unklar) wie bei anderen transzendenten Funktionen wie  $\sin x$  oder  $\cos x$ . Zur Verdeutlichung sei hier ein möglicher Berechnungsweg gezeigt: Wir können den Integranden von Gl. 643 mit Hilfe der Standardtaylorreihe der Exponentialfunktion umformen

$$e^\alpha = 1 + \alpha + \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^3}{3!} + \cdots \quad , \quad \text{mit } \alpha = -t^2 \quad (644)$$

und dann gliedweise integrieren:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \left( 1 - t^2 + \frac{t^4}{2} - \frac{t^6}{6} \pm \cdots \right) dt \quad (645)$$

$$= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left( x - \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} - \frac{x^7}{42} \pm \cdots \right) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \quad (646)$$

Die immense praktische Bedeutung der Fehlerfunktion ist daran zu erkennen, daß hoch-effiziente, maschinenspezifische Varianten derartiger Berechnungsformeln für diese Funktion auf jedem Computer zu finden sind. Weitere Berechnungswege für spezielle Funktionen ergeben sich aus Zusammenhängen mit anderen speziellen Funktionen, aus Rekursionsbeziehungen, oder notfalls durch direkte numerische Integration des definierenden Integrals. (Jeder Taschenrechner und jeder Computer berechnet Funktionen wie  $\sin x$  oder  $\cos x$  in aller Regel auch über derartige Reihenentwicklungsformeln.)

Weitere wichtige spezielle Funktionen sind u.a.:

$$\text{Exponentialintegral:} \quad \operatorname{ei}(x) := - \int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (647)$$

$$\text{Integralsinus:} \quad \operatorname{si}(x) := - \int_x^\infty \frac{\sin t}{t} dt \quad (648)$$

$$\text{Integralcosinus:} \quad \operatorname{ci}(x) := - \int_x^\infty \frac{\cos t}{t} dt \quad (649)$$

$$\text{Integrallogarithmus:} \quad \operatorname{li}(x) := \int_0^x \frac{dt}{\ln t} \quad (650)$$

Etwas anders definiert aber auch sehr wichtig ist die *Gammafunktion*:

$$\Gamma(x) := \int_0^\infty t^{x-1} e^{-t} dt \quad (651)$$

(Strenggenommen sollte man diesen Ausdruck evtl. eher als Integraltransformation bezeichnen, da  $x$  nicht als Integralgrenze vorkommt, sondern im Integranden.) Die *Fakultät* ist lediglich ein Spezialfall der Gammafunktion für positive, ganzzahlige Argumente:

$$\Gamma(n+1) = n! \quad , \quad \text{für } n \in \mathbb{N} \quad (652)$$

oder umgekehrt die Gammafunktion eine Erweiterung der Fakultät auf nicht-natürliche Argumente.

Ausblick: ♣ weitere „spezielle Funktionen“, insbes. Legendrefunktionen, Kugelflächenfunktionen (= Winkelanteil von H-Atomorbitalen!), usw.

## 5.9 symbolische Integration

Bei der Differentiation reicht uns in der Praxis ein sehr kleiner Satz von Ableitungsregeln (hauptsächlich die Produkt- und die Kettenregel) sowie eine überschaubare Tabelle von Ableitungen elementarer Funktionen, um damit Ableitungen auch komplizierter Funktionen ermitteln zu können. Im Gegensatz dazu haben die vorigen Abschnitte gezeigt, daß die Integrationsregeln (obwohl sie als Umkehrung der offenbar so mächtigen Differentiationsregeln verstanden werden können) nur in ausgewählten Fällen erfolgreich einsetzbar sind und daß Integration sogar bei scheinbar „harmlosen“ Integranden zu völlig neuen Stammfunktionen führt (Abschnitt 5.8). Historisch ist es unter Einsatz der unterschiedlichsten Methoden trotzdem gelungen, für sehr viele Integranden die zugehörigen Stammfunktionen zu konstruieren, also viele Integrale analytisch zu lösen – ohne daß sich dies jedoch in einen überschaubaren Regelsatz zusammenfassen ließe.

Daher wurden früher Integraltafeln verwendet, die im Gegensatz zur Differentiation ganz erheblich umfangreicher sind und viele Tausend Buchseiten umfassen, sodaß es einer strengen Systematik seitens der Integraltafelverfasser und viel Übung seitens der Benutzer bedurfte, um solche Werke überhaupt benutzen zu können, also festzustellen, ob ein vorliegendes Integral eine bekannte Lösung hat oder nicht.

Heute ist die Bewältigung großen Datenmaterials eine typische Aufgabe für Computer. Dementsprechend hat man Computerprogramme konstruiert, die einerseits in der Lage sind, vorliegende Integrale in elektronischen Versionen solcher Integraltafeln aufzufinden, andererseits aber auch Umformungsschritte wie partielle Integration und Variablensubstitution durchzuführen, also Integrationsregeln anzuwenden. Solche Programme sind in zahlreiche Mathematik-Programmpakete inkorporiert und nach Erlernen einer definierten input-Syntax relativ leicht bedienbar. Es sei jedoch betont, daß hinter dieser *symbolischen Integration* nicht signifikant mehr steckt als eine Automatisierung des vorher bereits erreichten Wissensstands. Ein symbolisches Integrationsprogramm kann also letztlich nicht mehr leisten als das, was ein versierter Benutzer eines sehr guten Integraltafelwerks früher auch konnte. Insbesondere ändert sich nichts an der vorher geschilderten grundsätzlichen Problematik der analytischen Integration.

## 5.10 Ableitung von Integralausdrücken

Zur weiteren Verdeutlichung des Zusammenhangs zwischen Differentiation und Integration betrachten wir in diesem Unterabschnitt verschiedene Ableitungen von Integralausdrücken, bei denen Funktionen von  $x$  im Integral an verschiedenen Stellen vorkommen: Ober- bzw. Untegrenze sowie Integrand.



**5.10.1 obere Grenze ist Funktion von  $x$ :**

In offensichtlicher Erweiterung des ersten Hauptsatzes definiert bei stetigem Integranden  $f(t)$  das folgende Integral eine neue Funktion  $g(x)$ :

$$g(x) = \int_{x_0}^{\phi(x)} f(t) dt \quad (653)$$

In analoger Erweiterung des zweiten Hauptsatzes läßt sich dieses Integral berechnen als:

$$g(x) = \int_{x_0}^{\phi(x)} f(t) dt = F[\phi(x)] - F(x_0) \quad (654)$$

Wenn wir diesen Ausdruck nun nach  $x$  ableiten, entfällt der konstante zweite Summand  $F(x_0)$  auf der rechten Seite, und der erste Summand liefert nach der Kettenregel:

$$\frac{dg}{dx} = \frac{dF}{d\phi} \frac{d\phi}{dx} = f[\phi(x)] \phi'(x) \quad (655)$$

wobei im zweiten Schritt der erste Hauptsatz Gl. 562 verwendet wurde.

**5.10.2 untere Grenze ist Funktion von  $x$ :**

Diese Situation entspricht der vorigen, wobei lediglich die Grenzen vertauscht sind und somit ein anderes Vorzeichen resultiert:

$$g(x) = \int_{\psi(x)}^{x_0} f(t) dt = F(x_0) - F[\psi(x)] \quad (656)$$

$$\frac{dg}{dx} = -\frac{dF}{d\psi} \frac{d\psi}{dx} = -f[\psi(x)] \psi'(x) \quad (657)$$

**5.10.3 Integrand ist Funktion von  $x$ :**

Im Gegensatz(!) zur Situation des ersten Hauptsatzes Gl. 561 könnte die Variable  $x$  nicht in der (Ober-)Grenze, sondern im Integranden auftreten:

$$g(x) = \int_a^b f(x, t) dt \quad (658)$$

Dadurch wird  $f$  offenbar eine Funktion von zwei Variablen  $x$  und  $t$  (wobei nur über eine von beiden, hier  $t$ , integriert wird, sodaß das Resultat immer noch eine Funktion von  $x$  und keine (konstante) Zahl ist). Diese Situation wird also erst im nächsten Kapitel (Differentiation von Funktionen mit mehreren Variablen) bzw. in MfC2 (Integration von Funktionen mit mehreren Variablen) vollständig klar werden. Nichtsdestotrotz seien die Ergebnisse hier schon angedeutet:

Wenn wir in dieser Situation die Ableitung  $dg/dx$  bilden wollen, können wir zunächst die Reihenfolge der Integration und der Differentiation vertauschen (was nach der anfänglichen Definition des Integrals aus Unter- bzw. Obersumme nach der Summenregel der Differentiation plausibel erscheint) und dann den Integranden partiell nach  $x$  ableiten (Ableitung nach  $x$ , bei der  $t$  formal wie eine Konstante behandelt wird, siehe Kapitel 6):

$$\frac{dg}{dx} = \int_a^b \frac{\partial f(x, t)}{\partial x} dt \quad (659)$$

Fassen wir schließlich alle drei hier betrachteten Situationen zusammen:

$$g(x) = \int_{\psi(x)}^{\phi(x)} \chi(x, t) dt \quad (660)$$

Hier ist  $g$  offenbar eine mittelbare Funktion von  $x$ , mit Funktionen von  $x$  an mehreren Stellen: in beiden Integralgrenzen sowie im Integranden. Wie wir im Kapitel 6 sehen werden, ist eine solche Situation mit der auf mehrere Variable erweiterten Kettenregel behandelbar:

$$\frac{dg}{dx} = \frac{\partial g}{\partial \phi} \frac{d\phi}{dx} + \frac{\partial g}{\partial \psi} \frac{d\psi}{dx} + \frac{\partial g}{\partial \chi} \frac{d\chi}{dx} \quad (661)$$

Die einzelnen Terme auf der rechten Seite entsprechen den drei oben besprochenen Fällen. Als Beispiel betrachten wir:

$$g(x) = \int_x^{x^2} \sin(xt^2) dt \quad (662)$$

wofür sich nach Gl. 661 folgende Ableitung ergibt:

$$\frac{dg}{dx} = \sin(x \cdot x^4) \cdot 2x - \sin(x \cdot x^2) \cdot 1 + \int_x^{x^2} \cos(x \cdot t^2) \cdot t^2 dt \quad (663)$$

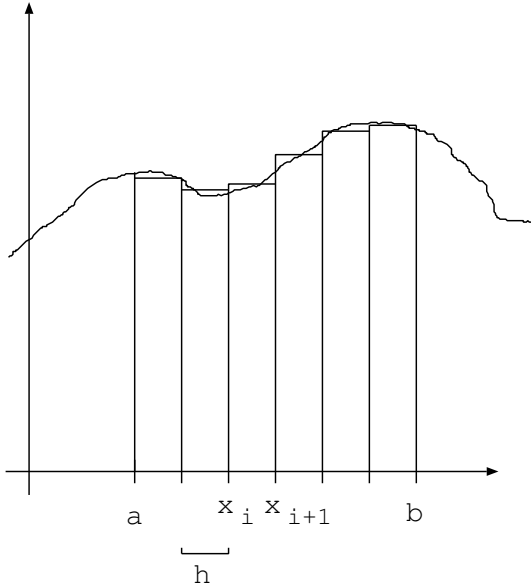
## 5.11 Laplacetransformation

## 5.12 numerische Integration

Die im Abschnitt 5.9 erläuterte symbolische Integration auf dem Computer ist sorgfältig zu trennen von der numerischen Integration, die heute natürlich in aller Regel auch mit Computerhilfe durchgeführt wird. Genauso wie bei der Differentiation versucht die symbolische Integration die per Hand durchgeführte, analytische Integration zu automatisieren (also auf denselben Wegen zum selben Ziel zu gelangen), während die numerische Integration letztlich versucht, die analytische Integration durch Näherungen zu ersetzen, die die analytische Konstruktion von Stammfunktionen komplett vermeiden.

Bei der numerischen Differentiation (finite Differenzen, Abschnitt 4.6.2) wurden u.a. zwei Grundgedanken verwendet, die hier auch wieder auftauchen: Diskretisierung der  $x$ -Achse und Rekurs auf die ursprüngliche Definition unter Vermeidung des dort auftretenden Limes. Bei der numerischen Integration erinnern wir uns an die ursprüngliche Definition des bestimmten

Integrals am Anfang von Abschnitt 5.1, also als Summe von Rechtecksflächeninhalten (Unter- bzw. Obersumme). Das einfachste Schema zur numerischen Integration, die *Trapezregel* (*Euler-Verfahren*), realisiert genau diese Unter- bzw. Obersummen, lediglich mit der kleinen Variation, daß als Höhe der Rechtecke nicht der minimale (Untersumme) oder maximale (Obersumme) Funktionswert im jeweiligen  $x$ -Streifen gewählt wird, sondern der Mittelwert  $\langle f \rangle$  der Integrandfunktion  $f(x)$  gemäß dem Mittelwertsatz der Integralrechnung Gl. 559. Dann erhalten wir:



$$\int_a^b f(x) dx = \langle f \rangle_a^b (b-a) \quad (664)$$

$$= h \sum_{i=1}^N \langle f \rangle_{x_i}^{x_{i+1}} \quad (665)$$

$$\approx h \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} (f_i + f_{i+1}) \quad (666)$$

$$= h \left( \frac{1}{2} f_1 + f_2 + \dots + f_{N-1} + \frac{1}{2} f_N \right) \quad (667)$$

Im dritten Schritt wurde dabei der (eigentlich zunächst unbekannte, exakte) Mittelwert der Funktion innerhalb eines Streifens ersetzt durch den (trivial zu berechnenden, approximativen) Mittelwert aus den Funktionswerten am linken und rechten Streifenrand, was offensichtlich bei hinreichend schmalen Streifen eine gute Approximation wird (genauer: es reicht nicht, daß die Streifen auf einer generellen, absoluten Skala schmal sind, sondern sie müssen schmal sein relativ zu den höchstfrequenten Oszillationen des Integranden).

Bei näherer Betrachtung stellt sich heraus, daß wir zum selben Endresultat gekommen wären, wenn wir in jedem Intervall zwischen  $x_i$  und  $x_{i+1}$  nicht Rechtecke sondern Trapeze konstruiert hätten, die am linken und rechten Rand jeweils genau die Höhe des Funktionswerts haben (also  $f(x_i)$  bzw.  $f(x_{i+1})$ ), was die Flächenberechnung nicht wesentlich erschwert (daher auch der Name Trapezregel). Dies kann auch so uminterpretiert werden, daß die Integrandfunktion  $f(x)$  in jedem dieser Abschnitte zwischen  $x_i$  und  $x_{i+1}$  durch jeweils ein Geradenstück approximiert wird.

Dementsprechend ist die Trapezregel exakt, wenn der Integrand eine Gerade ist (das ist zwar unabhängig von der Feinheit der Diskretisierung, aber trotzdem ein wenig beeindruckendes Resultat), oder eine gute Approximation, wenn der Integrand stückweise durch Taylorreihen sehr niedriger Ordnung gut darstellbar ist. Genauer ausgedrückt ist der Fehler der Trapezregel zweiter Ordnung in  $h$ :  $\mathcal{O}(h^2)$ .

Bessere numerische Integrationsverfahren lassen sich durch Verbesserung der gerade dargestellten Approximation erreichen: Wenn die Integrandfunktion in jedem Streifen nicht durch Geradenstücke approximiert wird, sondern durch Parabelstücke, erhalten wir die

*Simpsonregel:*

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f_1 + 4f_2 + 2f_3 + 4f_4 + \cdots + 2f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N) \quad (668)$$

Sie ist exakt für Polynome 3. Ordnung; die Fehlerordnung ist  $\mathcal{O}(h^4)$ . In ähnlicher Weise lassen sich zahlreiche Formeln noch höherer Ordnung konstruieren, die in den einzelnen Summentermen erheblich kompliziertere Koeffizientenwerte aufweisen können.

All diese Integrationsvorschriften haben dieselbe allgemeine Form:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^N c_i f(x_i) + \text{Fehler}(N, \dots) \quad (669)$$

Das bestimmte Integral wird also ersetzt durch eine (endliche) Summe. Für jeden Summenterm muß einmal die Integrandfunktion  $f$  an einer vorgegebenen Stelle  $x_i$  (der sogenannten *Stützstelle*) berechnet und mit einem geeigneten Koeffizienten  $c_i$  multipliziert werden. Wie wir oben gesehen haben, stecken hinter diesen Formeln implizite Approximationen an den Funktionsverlauf *zwischen* den Stützstellen; aus diesen approximativen Annahmen ergeben sich die Werte der Koeffizienten  $c_i$ . Da wir den Grenzübergang  $N \rightarrow \infty$  (äquivalent zu  $h \rightarrow 0$ ) von der Unter-/Obersumme zum exakten bestimmten Integral gemäß Gl. 552 numerisch nicht durchführen können (zumindest nicht auf naive Weise, siehe die Diskussion in Abschnitt 4.6.2), machen wir einen Fehler, dessen Größe(nordnung) sowohl von den Approximationen im Summenterm abhängt als auch von der Anzahl  $N$  der summierten Terme. Da jeder Summenterm eine Funktionsberechnung benötigt, ist man immer bestrebt, das Verhältnis von Rechenaufwand zu Genauigkeit dadurch zu optimieren, daß der Fehler mit wachsendem  $N$  möglichst rasch kleiner werden sollte (was einer möglichst hohen Fehlerordnung in  $N$  bzw.  $h$  entspricht).

Tatsächlich haben wir in Gl. 669 eine weitere Gestaltungsfreiheit bisher unberücksichtigt gelassen: Alle obigen Formeln setzen implizit ein äquidistantes Punktgitter (einen einzigen Wert für  $h$ ) voraus; man nennt sie zusammenfassend Newton-Cotes-Formeln. Tatsächlich läßt sich eine im allgemeinen bessere Klasse von Integrationsformeln konstruieren, die Gauß-Integrationsformeln, wenn man nicht-äquidistante Stützstellen wählt. Die dahinterstehende Theorie (die auch die Lage dieser Punkte und die dazugehörigen Koeffizienten spezifiziert) sprengt jedoch den Rahmen dieser Veranstaltung und ist letztlich zur reinen Anwendung auch nicht nötig. Die letztlich resultierenden Formeln haben wieder dieselbe Form wie Gl. 669.

Stattdessen sollen hier noch vier Aspekte erwähnt werden, die für die Anwendungspraxis wichtiger sind: Wie die Newton-Cotes-Formeln machen auch die Gauß-Integrationsformeln implizite Annahmen über den Funktionsverlauf des Integranden zwischen den Stützstellen. Wenn der tatsächliche Funktionsverlauf des Integranden sich nicht allzusehr von diesen Annahmen unterscheidet, können wir darauf bauen, daß Integralformeln höherer Fehlerordnung tatsächlich bessere Resultate liefern und auch daß Gauß-Integration besser sein wird als Newton-Cotes-Formeln. Bei "exotischeren" Integranden muß sich aber der möglicherweise höhere Aufwand für eine formal bessere Integration nicht notwendigerweise immer lohnen.

In der Praxis haben wir möglicherweise relativ wenig Information über den tatsächlichen Funktionsverlauf des Integranden (was nicht schädlich ist, weil wir ja nur in der Lage

sein müssen, den Integranden an einer endlichen Anzahl von Stützstellen auszurechnen). Dann können wir a priori aber auch nicht einschätzen, ob unser Stützstellenabstand  $h$  hinreichend klein gegenüber den Änderungen des Integranden ist (s.o.): Ein für ein Integral ausreichend kleines  $h$  kann für ein anderes Integral viel zu groß sein. Daher ist es in der Praxis i.A. *nicht* ausreichend, mit einem geratenen  $h$ -Wert eine beliebige Integrationsformel der Art von Gl. 669 anzuwenden; das Resultat könnte ausreichend genau sein oder aber desaströs falsch. Ein typischer Ausweg aus dieser Situation ist, mehrere Berechnungen nach Gl. 669 durchzuführen und dabei jedesmal einen (systematisch) kleineren Wert für  $h$  zu wählen, bis sich die resultierenden Integralwerte von einer dieser *Iterationen* zur nächsten nur noch so wenig ändern, daß unser Genauigkeitsanspruch befriedigt wird (dann haben wir *Konvergenz* erreicht). Dieses Vorgehen läßt sich natürlich auch sehr einfach automatisieren: Ein typisches Integrationsprogramm enthält daher um die eigentliche Integrationsformel herum in der Regel eine Iterationsschleife, die mit einem Konvergenzkriterium abgebrochen wird.

Abstrakter gesehen ist der entscheidende Vorteil aller numerischen Integrationsverfahren von Typ Gl. 669, daß lediglich eine (mehrfache) Auswertung der Integrandfunktion  $f(x)$  nötig ist, im Gegensatz zu unserer analytischen Standardformel Gl. 568 (2. Hauptsatz), die das bestimmte Integral durch den Ausdruck  $F(b) - F(a)$  ersetzt. Der entscheidende Vorteil der numerischen Vorschrift ist also, daß sie auch dann noch einsetzbar ist, wenn wir die Stammfunktion  $F(x)$  nicht ermitteln können – und wie wir in den vorigen Abschnitten gesehen haben, ist das aus prinzipiellen Gründen durchaus eine Situation, mit der wir in der Praxis häufig konfrontiert sein werden.

Gleichzeitig ist Gl. 669 numerisch robust: Bei der numerischen Differentiation hatten wir das Problem, daß wir Differenzen von Zahlen gleicher Größenordnung bilden müssen, wodurch das unvermeidliche numerische Rauschen stark vergrößert wird. Hier addieren wir Zahlen gleicher Größenordnung, und das numerische Rauschen tendiert dazu, sich dabei herauszumitteln.

Natürlich zahlen wir für diese beiden großen Vorteile auch einen Preis:  $f(x)$  ist nicht nur ein- bzw. zweimal auszuwerten, sondern typischerweise einige Dutzend bis wenige Hundert mal pro Einsatz von Gl. 669, und wie dargestellt reicht eine einmalige Auswertung von Gl. 669 nicht aus, sondern wir müssen die Berechnung mehrfach wiederholen, mit auch noch wachsender Anzahl von Funktionsauswertungen. Je nachdem, wie groß der rechnerische Aufwand für eine einzige Funktionsberechnung ist, kann die numerische Berechnung trotzdem die Methode der Wahl sein oder aber zu „teuer“ werden (insbesondere dann, wenn nicht nur ein Integral zu berechnen ist, sondern, wie in der theoretischen Quantenchemie, Milliarden von Integralen). In jedem Fall gilt: Wenn wir einen einfachen Weg sehen, die Stammfunktion  $F(x)$  zu ermitteln, sollten wir das tun, denn dann reduzieren wir den Aufwand definitiv auf nur zwei Funktionsberechnungen:  $F(b) - F(a)$ .

Als wichtigste allgemeine Erkenntnis aus den kurzen Einblicken in die numerischen Verfahren in diesem Abschnitt und in Abschnitt 4.6.2 bleibt festzuhalten: Analytisch (mit Papier und Bleistift) ist Differentiation leicht und Integration schwierig, numerisch ist es genau umgekehrt.

## 6 Differentialrechnung von Funktionen mehrerer Veränderlicher

Eine Funktion  $f$  von mehreren Variablen  $y = f(x_1, x_2, \dots, x_n) = f(\{x_i\})$  bildet das  $n$ -tupel von unabhängigen Variablen  $\{x_i\}$ , deren Werte alle im Definitionsbereich von  $f$  liegen müssen, eindeutig auf eine resultierende Zahl (abhängige Variable  $y$ ) im Wertebereich ab:

$$\{x_i\} \in \mathbb{D} \xrightarrow{f} y \in \mathbb{W} \quad (670)$$

Vektorwertige Funktionen, bei denen ein  $m$ -tupel von Zahlen im Wertebereich resultiert, werden später behandelt, siehe MfC2. Im folgenden wird häufig die Bezeichnung  $f$  in salopper Weise sowohl für die Abbildung als auch für die resultierende Zahl verwendet, sowie gelegentlich auch  $y$  als eine der unabhängigen Variablen eingesetzt.

### 6.1 Graphische Darstellung

Bei Funktionen von einer Variablen ist die graphische Darstellung des Funktionsverlaufs ein wichtiges Veranschaulichungsmittel. Bei Funktionen von mehreren Variablen wird die graphische Darstellung schnell problematisch, da unsere Vorstellung auf drei Dimensionen beschränkt ist: Bereits eine Funktion  $f(x, y)$  von zwei Variablen entspricht einer Fläche im dreidimensionalen  $x, y, f$ -Raum. Sie kann daher noch als Ganzes in Form einer *Reliefdarstellung* veranschaulicht werden (entsprechend einem Gebirgsmodell). Hält man eine der beiden Koordinaten, z.B. die  $y$ -Koordinate, konstant, ergeben sich *Schnittkurven* im  $x, f$ -Raum, die für den jeweils gewählten  $y$ -Wert charakteristisch sind und als Funktionen einer Variablen veranschaulicht werden können. In ähnlicher Weise ist es auch möglich, einer der beiden unabhängigen Variablen als eine beliebige Funktion der anderen unabhängigen Variablen auszudrücken, im einfachsten Fall z.B.  $y = x$  (erste Winkelhalbierende in der  $x, y$ -Ebene). Einsetzen dieser Beziehung in den Funktionsausdruck  $f(x, y)$  liefert dann wiederum eine Funktion nur noch einer Variabler, die dann den Schnitt durch  $f(x, y)$  entlang der gewählten Kurve in der  $x, y$ -Ebene liefert (im Beispiel  $y = x$  entlang der ersten Winkelhalbierenden).

Eine Funktion  $f(x, y, z)$  von drei Variablen ist als Ganzes bereits nicht mehr darstellbar; sie entspricht einer Hyperfläche im vierdimensionalen  $x, y, z, f$ -Raum. Bei Festhalten einer Koordinate ergibt sich eine Reliefdarstellung bzw. beim Festhalten zweier Koordinaten Schnittkurven.

Für Funktionen von zwei oder mehr Variablen wählt man gerne auch eine andere Darstellungsmöglichkeit: die Menge aller Punkte, für die der Funktionswert einer (vorgegebenen) Konstanten entspricht:  $f(\{x_i\}) = f_0$ . Bei einer Funktion  $f(x, y)$  von zwei Variablen ergeben sich dabei *Niveaulinien* in der  $x, y$ -Ebene (entsprechend einer Höhenliniendarstellung eines Gebirges). Bei Funktionen  $f(x, y, z)$  von drei Variablen resultieren *Niveauflächen* im dreidimensionalen  $x, y, z$ -Raum, deren Veranschaulichung bereits problematisch ist (da ihre Größe, Form und Lage vom gewählten Wert  $f_0$  abhängt und mehrere Niveauflächen für unterschiedliche  $f_0$  sich häufig ineinanderschachteln). Bei Funktionen von vier Variablen resultieren wiederum nicht als Ganzes darstellbare Niveauperflächen.

Beispiele: ♣ siehe Vorlesung.

## 6.2 Grenzwert und Stetigkeit

Der Grenzwert einer Funktion  $f(\{x_i\})$  mehrerer Variabler existiert, wenn *alle* eindimensionalen Grenzwerte entlang *aller* möglichen verschiedenen Wege der Annäherung an die betrachtete Stelle  $\{x_{i0}\}$  existieren und einander gleich sind.

Eine Funktion mehrerer Variabler  $f(\{x_i\})$  heißt an der Stelle  $\{x_{i0}\}$  stetig, wenn der mehrdimensionale Grenzwert existiert und mit dem Funktionswert an dieser Stelle übereinstimmt:

$$\lim_{\{x_i\} \rightarrow \{x_{i0}\}} f(\{x_i\}) = f(\{x_{i0}\}) \quad (671)$$

Man beachte hierbei den erheblichen Unterschied zur Situation bei Funktionen einer Variablen: Dort gab es nur genau zwei mögliche Annäherungen an einen Punkt  $x_0$ : von rechts oder von links. Bereits in einer zweidimensionalen  $x, y$ -Ebene gibt es dagegen unendlich viele mögliche Richtungen der Annäherung an einen Punkt, und darüber hinaus sogar Annäherungen nicht nur auf Geraden, sondern auf gekrümmten Kurven beliebiger Form. Dementsprechend sind Existenz von Grenzwerten sowie Stetigkeit bei Funktionen mehrerer Variabler eine wesentlich schärfere Forderung als bei Funktionen einer Variabler, und auch die solide Untersuchung von Grenzwerten und Stetigkeit ist erheblich aufwendiger. Sie soll daher hier nicht weiter vertieft werden.

Beispiele: ♣ folgen später...

## 6.3 Partielle Ableitung

### 6.3.1 erste partielle Ableitung, Differenzierbarkeit

Die *partielle Ableitung* von  $f(\{x_i\})$  nach der Variable  $x_i$  an der Stelle  $x_{i0}$  ist definiert als:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_{x_{i0}} = \lim_{x_i \rightarrow x_{i0}} \frac{f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_{i0}, \dots, x_n)}{x_i - x_{i0}} \quad (672)$$

Dies entspricht völlig der Definition bei Funktionen einer Variablen, als Grenzwert eines Differenzenquotienten; die anderen Variablen im Funktionsausdruck  $f(\cdot)$  werden beim Ableiten wie Konstante behandelt. Die praktische Berechnung der Ableitung verläuft daher wie bei Funktionen einer Variablen, unter Zuhilfenahme derselben Regeln (Summenregel, Produktregel, Quotientenregel, Kettenregel) und derselben Grundableitungen elementarer Funktionen. Weil es natürlich dennoch ein wesentlicher Unterschied ist, ob eine Funktion einer Variablen nach dieser einen Variablen abgeleitet wird (und damit nach allen Variablen, von denen sie abhängt) oder ob eine Funktion mehrerer Variabler nach einer einzigen dieser Variablen abgeleitet wird, verwenden wir für den partiellen Ableitungsoperator die leicht modifizierte Notation  $\partial/\partial x$  und reservieren die bisherige Notation  $d/dx$  für die Situation, in der nach allen Variablen abgeleitet wird. (In Abschnitt 6.5 werden wir das totale Differential  $df$  einer Funktion  $f$  von mehreren Variablen kennenlernen, das einer Änderung in allen Variablen entspricht und bei dem daher konsequenterweise wieder  $d$  statt  $\partial$  verwendet wird.)

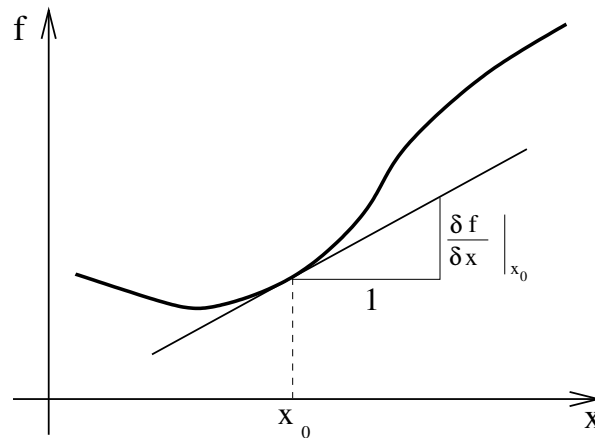
Eine Funktion  $f(\{x_i\})$  heißt in  $\{x_i\}$  (stetig) differenzierbar, wenn *alle* partiellen Ableitungen  $\partial f/\partial x_i$  im Punkt  $x_{i0}$  (also die entsprechenden Grenzwerte der Differentialquotienten) existieren (und stetig sind).

*Beispiel:* Die beiden ersten partiellen Ableitungen der Funktion  $f(x, y) = \exp(x^2 - xy)$  lauten:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = e^{x^2-xy}(2x - y) \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial y} = e^{x^2-xy}(-x) \quad (673)$$

(Die Stetigkeit dieser partiellen Ableitungen wäre gesondert zu untersuchen.)

Die partielle Ableitung  $\partial f / \partial x$  einer Funktion  $f(x, y)$  von zwei Variablen kann geometrisch interpretiert werden als Steigung der Tangente an alle Schnittkurven der Funktion in allen  $x, f$ -Ebenen. Man beachte, daß diese partielle Ableitung im allgemeinen noch eine Funktion von  $x$  und  $y$  ist. Die Wahl eines bestimmten  $y$ -Werts  $y_0$  legt eine bestimmte  $x, f$ -Ebene fest und damit eine bestimmte Form der Schnittkurve (die sich mit  $y$  ändern würde). Diese Schnittkurve ist eine Funktion einer Variablen (hier:  $x$ ); bei Wahl eines bestimmten  $x$ -Werts  $x_0$  erhält man dann einen (konstanten) Zahlenwert für die Tangentensteigung (dann ist ein einziger, eindeutiger Punkt  $(x_0, y_0)$  in der  $x, y$ -Ebene bzw. Werte für beide unabhängige Variable in  $\partial f / \partial x$  definiert). Analoges gilt für  $\partial f / \partial y$ .



In Abschnitt 6.6 werden wir sehen, daß die partiellen Ableitungen auch als Ableitungen in spezielle Richtungen (in die der Einheitsvektoren entlang der Koordinatenachsen) aufgefaßt werden können.

### 6.3.2 höhere partielle Ableitungen, Satz von Schwarz

Wie bei Funktionen einer Variablen liefert das Hintereinanderausführen partieller Ableitungen von Funktionen mehrerer Variabler höhere partielle Ableitungen. Zu unterscheiden sind *reine* und *gemischte* partielle Ableitungen. Die reinen Ableitungen 2. Ordnung sind:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (674)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \quad (675)$$

Die gemischten Ableitungen 2. Ordnung sind:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{\partial f}{\partial y} \right) = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \quad (676)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \quad (677)$$



Analog ergeben sich Ableitungen höherer Ordnung durch weitere Ableitungsoperationen. Für die Funktion  $f(x, y) = x \sin y + y \exp(x)$  erhalten wir zum Beispiel folgende erste partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \sin y + ye^x \quad , \quad \frac{\partial f}{\partial y} = x \cos y + e^x \quad (678)$$

Wie wir in Kürze sehen werden, faßt man diese beiden ersten partiellen Ableitungen zum Gradientenvektor zusammen, der den „Anstieg“ der Funktion  $f(x, y)$  charakterisiert. Weiterhin erhalten wir folgende zweite partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = ye^x \quad , \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = \cos y + e^x \quad (679)$$

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \cos y + e^x \quad , \quad \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = -x \sin y \quad (680)$$

Diese zweiten partiellen Ableitungen sind die Komponenten der Hessematrix, aus deren Eigenwerten (siehe MfC2) man Aussagen über die „Krümmung“ der Funktion  $f(x, y)$  machen kann.

Es fällt auf, daß die beiden gemischten partiellen Ableitungen Gln. 679,680 in diesem Beispiel gleich sind. Dies ist kein Zufall, sondern unter bestimmten Voraussetzungen der Regelfall. Es gilt der *Satz von Schwarz*: Ist  $f(x, y)$  in einer Umgebung von  $(x_0, y_0)$  stetig, existieren weiter die partiellen Ableitungen  $\partial f / \partial x$ ,  $\partial f / \partial y$ ,  $\partial^2 f / (\partial y \partial x)$  und sind diese in  $(x_0, y_0)$  stetig, so existiert in  $(x_0, y_0)$  auch die stetige partielle Ableitung  $\partial^2 f / (\partial x \partial y)$  und es gilt:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x_0, y_0} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \right|_{x_0, y_0} \quad (681)$$

Dies läßt sich folgendermaßen begründen: Unter Ausnutzung der Existenz und Stetigkeit von  $\partial f / \partial x$  gilt nach dem 2. Hauptsatz:

$$\int_{x_0}^x \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} dx = f(x, y) - f(x_0, y) \quad (682)$$

Unter Ausnutzung von Existenz und Stetigkeit von  $\partial f / \partial y$  und  $\partial^2 f / (\partial y \partial x)$  läßt sich Gl. 682 auf beiden Seiten partiell nach  $y$  ableiten. Nach Vertauschung der Reihenfolge von Differentiation und Integration auf der linken Seite erhalten wir:

$$\int_{x_0}^x \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y \partial x} dx = \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} - \frac{\partial f(x_0, y)}{\partial y} \quad (683)$$

Partielle Ableitung von Gl. 683 auf beiden Seiten nach  $x$  liefert schließlich die Behauptung:

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \quad (684)$$

wobei auf der linken Seite der 1. Hauptsatz verwendet wurde und die partielle Ableitung des zweiten Terms auf der rechten Seite von Gl. 683 nach  $x$  Null ist, da dieser Term nicht von  $x$  sondern von  $x_0$  abhängt, was aber eine Konstante ist.

Der Satz von Schwarz läßt sich integrieren zu:

$$\int_{x_0}^x \int_{y_0}^y \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} dy dx = \int_{y_0}^y \int_{x_0}^x \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} dx dy = f(x, y) - f(x_0, y_0) \quad (685)$$

Da die Integration in  $x$  (analog zur partiellen Ableitung nach  $x$ ) hier parallel zur  $x$ -Achse verläuft und die Integration in  $y$  parallel zur  $y$ -Achse, entsprechen die ersten beiden Ausdrücke zwei verschiedenen Integrationswegen, die aber zum selben Resultat führen; diese Integrale sind also wegunabhängig. Dies dokumentiert auch die rechte Seite, die zeigt, daß das Resultat nur vom Anfangs- und Endpunkt abhängt, nicht aber vom Weg dazwischen. Bei der Betrachtung von Kurvenintegralen in MfC2 werden wir sehen, daß diese Wegunabhängigkeit (sofern sie überhaupt gegeben ist) nicht auf achsenparallele Wege beschränkt ist, sondern auch für völlig beliebige Wege zwischen Anfangs- und Endpunkt gilt.

Diese Konzepte erweisen sich als wichtig in der chemischen Thermodynamik. Dort gilt der Satz von Schwarz für sogenannte *Zustandsfunktionen*. Ein Beispiel ist das Volumen eines idealen Gases, gegeben durch  $V = nRT/p$ . Für diesen Volumenausdruck erhalten wir folgende erste partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial V}{\partial T} = \frac{nR}{p} \quad , \quad \frac{\partial V}{\partial p} = \frac{-nRT}{p^2} \quad (686)$$

sowie folgende gemischte zweite partielle Ableitungen:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial p \partial T} = \frac{-nR}{p^2} \quad , \quad \frac{\partial V}{\partial T \partial p} = \frac{-nR}{p^2} \quad (687)$$

Die Gleichheit dieser gemischten zweiten partiellen Ableitungen zeigt, daß das Volumen eines idealen Gases eine Zustandsfunktion ist, also nicht vom Weg abhängt, in dem der jeweils vorliegende Zustand erreicht wurde (das Gas hat kein „Erinnerungsvermögen“).

## 6.4 Gradientenvektor

Es erweist sich als vorteilhaft, die ersten partiellen Ableitungen als Komponenten eines Vektors, des *Gradientenvektors*, aufzufassen (zur Vereinfachung der Notation schreiben wir hier und im folgenden viele Definitionen und Zusammenhänge explizit für drei Variablen  $x, y, z$ , alles gilt aber analog auch im allgemeinen Fall von  $n \geq 2$  Variablen, speziell auch für  $n > 3$ ):

$$\nabla f = \vec{\nabla} f = \text{grad} f = \begin{pmatrix} \partial f / \partial x \\ \partial f / \partial y \\ \partial f / \partial z \end{pmatrix} \quad (688)$$

Dies definiert den sogenannten *Gradienten* von  $f$ , die legitime Verallgemeinerung der ersten Ableitung von Funktionen einer Variablen auf Funktionen mehrerer Variabler. Dabei wurde der *Nabla-Operator*  $\nabla$  verwendet:

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial / \partial x \\ \partial / \partial y \\ \partial / \partial z \end{pmatrix} \quad (689)$$

Formal wichtig ist dabei, daß die Funktion  $f(x, y, z)$  jedem Punkt im 3D-Raum (innerhalb ihres Definitionsbereichs) einen skalaren Funktionswert zuordnet; es handelt sich also um ein Skalarfeld. Das Resultat der Wirkung des Nabla-Operators auf die Funktion  $f(x, y, z)$  ist dagegen ein Vektor, in jedem Punkt des 3D-Raums; der Gradient eines Skalarfelds ist also ein Vektorfeld.

Der *Laplace-Operator*  $\Delta$  ist formal das Skalarprodukt des Nabla-Operators mit sich selbst:

$$\Delta = \nabla^2 = \left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (690)$$

$\Delta f$ , das Resultat der Wirkung des Laplace-Operators auf die Funktion  $f$ , ist also wieder ein Skalarfeld. Der Laplace-Operator tritt in der mathematischen Physik und Chemie sehr häufig auf; unter anderem ist er der wesentliche Teil des Ausdrucks für die kinetische Energie in der Schrödingergleichung, der Grundgleichung der Quantenmechanik und der gesamten theoretischen Chemie.

## 6.5 Totales Differential

Das totale Differential  $df$  einer Funktion  $f$  von mehreren Variablen ist formal definiert als

$$df = \vec{\nabla} f \cdot d\vec{r} = \vec{\nabla} f \cdot (\hat{i} dx + \hat{j} dy + \hat{k} dz) = \left( \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right) \cdot \begin{pmatrix} dx \\ dy \\ dz \end{pmatrix} \quad (691)$$

Dies ist offensichtlich das mehrdimensionale Pendant zur Differentialbeziehung  $dy = f' dx$  bei Funktionen einer Variablen (siehe Gl. 441 auf S. 70). Nach Ausführung des Skalarprodukts sieht Gl. 691 folgendermaßen aus:

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} dx + \frac{\partial f}{\partial y} dy + \frac{\partial f}{\partial z} dz \quad (692)$$

$df$  ist ein Maß für die Änderung des Funktionswerts, bei Fortschreiten um  $dx$  im eindimensionalen Fall bzw. bei Fortschreiten um  $d\vec{r} = (dx, dy, dz)$  im mehrdimensionalen Fall.

Totale Differentiale sind eine wichtige Größe in der Thermodynamik. Als Beispiel sei wieder das ideale Gas erwähnt, mit der Beziehung  $V = RT/p$  (für 1 Mol). Das totale Differential  $dV$  dieser Funktion  $V(p, T)$  lautet:

$$dV = \frac{\partial V}{\partial T} dT + \frac{\partial V}{\partial p} dp = \frac{R}{p} dT - \frac{RT}{p^2} dp \quad (693)$$

Dies beschreibt, wie sich das Volumen des idealen Gases ändert, wenn Temperatur und/oder Druck verändert werden.

Wie bereits im eindimensionalen Fall (s.S. 70) kann  $df$  als Approximation an  $\Delta f$  verwendet werden (*Vorsicht*: Hier ist  $\Delta f$  eine Differenz von Funktionswerten, nicht die Wirkung des Laplace-Operators auf  $f$ !). Dadurch erhalten wir eine Näherung für den (maximalen) Fehler  $\Delta f$  der Funktion  $f(x, y, z)$ , der durch Meßfehler  $\Delta x$ ,  $\Delta y$ ,  $\Delta z$  in den unabhängigen Variablen  $x, y, z$  verursacht wird:

$$\Delta f \approx \left| \frac{\partial f}{\partial x} \Delta x \right| + \left| \frac{\partial f}{\partial y} \Delta y \right| + \left| \frac{\partial f}{\partial z} \Delta z \right| \quad (694)$$

Dabei wurden Betragsstriche eingeführt, um zu vermeiden, daß Fehlerkompensation durch unterschiedliche Vorzeichen auftritt.

Wird bei 1 Mol idealem Gas das Volumen  $V$  mit einem Fehler  $\Delta V$  und die Temperatur  $T$  mit einem Fehler  $\Delta T$  gemessen, können wir also folgende Maße für den Fehler im daraus via  $p = RT/V$  berechneten Druck  $p$  aufstellen:

$$\text{Fehler:} \quad \Delta p \approx \frac{\partial p}{\partial T} \Delta T + \frac{\partial p}{\partial V} \Delta V = \frac{R}{V} \Delta T - \frac{RT}{V^2} \Delta V \quad (695)$$

$$\text{relativer Fehler:} \quad \frac{\Delta p}{p} \approx \frac{\Delta T}{T} - \frac{\Delta V}{V} \quad (696)$$

$$\text{maximaler Fehler:} \quad \Delta p_{\max} \approx \frac{R}{V} |\Delta T| + \frac{RT}{V^2} |\Delta V| \quad (697)$$

$$\text{maximaler relativer Fehler:} \quad \frac{\Delta p_{\max}}{p} \approx \frac{|\Delta T|}{T} + \frac{|\Delta V|}{V} \quad (698)$$

## 6.6 Richtungsableitung

Wir zerlegen den Vektor  $d\vec{r}$  in seinen Betrag  $ds$  (Notation in Anlehnung an eine allgemeine Wegstrecke, die üblicherweise  $s$  heißt) und seine Richtung, die durch den Einheitsvektor  $\hat{e} = (e_x, e_y, e_z)$  gegeben ist:

$$d\vec{r} = \hat{e} ds = \begin{pmatrix} e_x ds \\ e_y ds \\ e_z ds \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_x \\ e_y \\ e_z \end{pmatrix} ds \quad (699)$$

Damit können wir das totale Differential Gl. 692 schreiben als:

$$df = \frac{\partial f}{\partial x} e_x ds + \frac{\partial f}{\partial y} e_y ds + \frac{\partial f}{\partial z} e_z ds \quad (700)$$

Division dieser Gleichung durch  $ds$  auf beiden Seiten liefert:

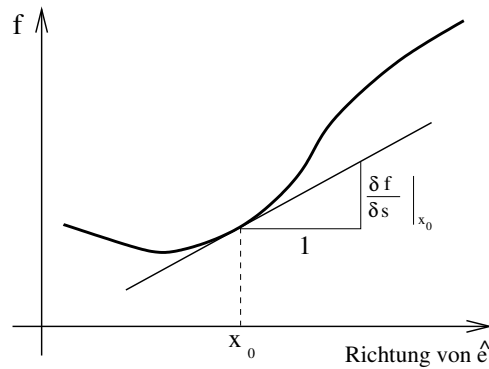
$$\frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x} e_x + \frac{\partial f}{\partial y} e_y + \frac{\partial f}{\partial z} e_z \quad (701)$$

Dieser neue Differentialquotient  $df/ds$  ist die *Richtungsableitung*, die wir offenbar auch als Skalarprodukt des Gradientenvektors mit dem Einheitsvektor  $\hat{e}$  erhalten können (also als Projektion des Gradientenvektors auf  $\hat{e}$ ), was auch ein einfaches Berechnungskonzept darstellt:

$$\frac{df}{ds} = \vec{\nabla} f \cdot \hat{e} \quad (702)$$

Die Richtungsableitung ist das mehrdimensionale Pendant zur Beziehung  $df/dx = f'$  bei Funktionen einer Variabler. Dabei steht der Vektor  $\hat{e}$  auf der rechten Seite von Gl. 702, da eine Division durch einen Vektor (wie in  $df/d\vec{r}$ ) strenggenommen nicht definiert ist.

Die Richtungsableitung gibt den Anstieg der Funktion  $f$  (Tangentensteigung) in Richtung des vorgegebenen Vektors  $\hat{e}$  an. Man beachte, daß es durchaus konsequent ist, die Richtungsableitung mit dem Symbol  $d$  statt  $\partial$  zu schreiben, da sie zwar eine Tangentensteigung in der eindimensionalen Größe  $s$  darstellt, gleichzeitig  $s$  aber eine beliebige Richtung ist, die im allgemeinen Anteile aller Variablen  $x$ ,  $y$  und  $z$  enthält.



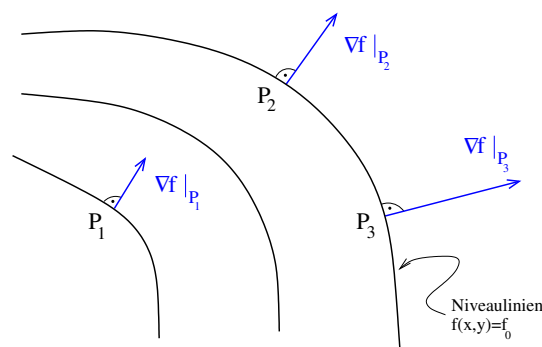
Offenbar gilt als Spezialfall der Richtungsableitung:

$$\hat{e} = \hat{i} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \frac{df}{ds} = \frac{\partial f}{\partial x} \quad (703)$$

sowie analoge Beziehungen für die Fälle, daß der Richtungsvektor gleich einem der anderen beiden kartesischen Einheitsvektoren gesetzt wird,  $\hat{e} = \hat{j}$  bzw.  $\hat{e} = \hat{k}$ . Wie oben bereits behauptet, sind die partiellen Ableitungen also nichts anderes als Richtungsableitungen parallel zur  $x$ -,  $y$ - bzw.  $z$ -Achse.

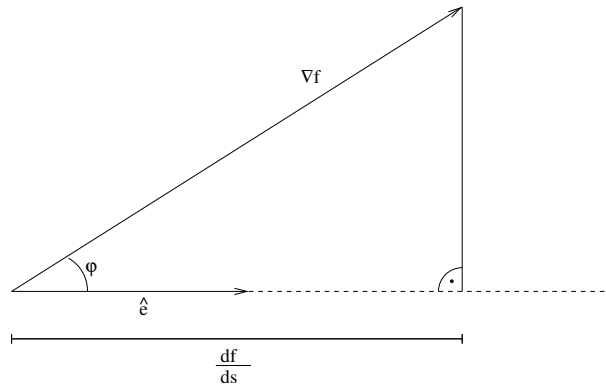
## 6.7 Geometrische Deutungen

Liegt der Vektor  $\hat{e}$  in einer Niveaulinie bzw. Niveaufläche, ändert sich beim Fortschreiten entlang  $\hat{e}$  um die Schrittweite  $ds$  der Funktionswert  $f$  nicht, weil Niveaulinien/-flächen die Gesamtheit aller Punkte mit gleichem Funktionswert sind. Es muß dann also  $\vec{\nabla} f \cdot \hat{e} = 0$  gelten. Da aber der Betrag von  $\hat{e}$  Eins ist und der Betrag des Gradienten ebenfalls im allgemeinen von Null verschieden ist, kann das Skalarprodukt nur dadurch Null werden, daß diese beiden Vektoren aufeinander senkrecht stehen: Der Gradientenvektor steht also überall senkrecht auf Niveaulinien/-flächen (d.h. senkrecht auf Tangenten/Tangentialebenen an diese Niveaulinien/-flächen im jeweiligen Punkt). Senkrecht zu den Niveaulinien/-flächen ist aber per Konstruktion die Änderung des Funktionswerts am größten (parallel dazu ist sie am kleinsten, nämlich Null).



Nach Gl. 702 entspricht die Richtungsableitung (die Steigung der Tangente in Richtung von  $\hat{e}$ ) der Länge der Projektion des Gradientenvektors auf  $\hat{e}$ , nimmt also für  $\vec{\nabla} f \parallel \hat{e}$  (entsprechend  $\varphi = 0$  und damit  $\cos \varphi = 1$ ) ihren Maximalwert  $|\vec{\nabla} f|$  an:

$$\frac{df}{ds} = \vec{\nabla} f \cdot \hat{e} = |\vec{\nabla} f| |\hat{e}| \cos \varphi = |\vec{\nabla} f| \quad (704)$$



Zusammengefaßt gilt also: Der Gradientenvektor  $\vec{\nabla}f$  gibt die Richtung des steilsten Anstiegs des Funktionswerts an (senkrecht zu Niveaulinien/-flächen), sein Betrag entspricht der Steilheit des Anstiegs in dieser Richtung.

Diese Eigenschaften des Gradientenvektors erlauben u.a. eine sehr einfache Bestimmung von Tangentialebenen an Funktionen von zwei Variablen (also an Flächen im 3D-Raum), wie es am folgenden Beispiel demonstriert werden soll: Die Gleichung

$$z = \frac{x^2}{4} + \frac{y^2}{9} \quad (705)$$

beschreibt ein elliptisches Paraboloid. Gesucht sei die Tangentialebene an dieses Paraboloid im Punkt  $P(2|3|2)$ . Wir können das Paraboloid als Niveaufläche einer Funktion  $F(x, y, z)$  umdeuten, für den Funktionswert  $F = 0$ ; die Gleichung dieser Niveaufläche ist dann

$$F(x, y, z) = z - \left( \frac{x^2}{4} + \frac{y^2}{9} \right) = 0 \quad (706)$$

Der Gradient dieser Funktion  $F$  lautet allgemein

$$\vec{\nabla}F = \begin{pmatrix} -x/2 \\ -2y/9 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (707)$$

bzw. im Punkt  $P$ :

$$\vec{\nabla}F = \begin{pmatrix} -1 \\ -2/3 \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{n} \quad (708)$$

Wegen der oben genannten Zusammenhänge ist dies zwangsläufig der Normalenvektor  $\vec{n}$  der Tangentialebene an das Paraboloid in diesem Punkt  $P$ , und  $P$  ist natürlich auch ein Punkt in dieser Tangentialebene. Daher können wir sofort die Vektorgleichung der Tangentialebene in Normalenform hinschreiben:

$$\vec{r} \cdot \vec{n} = \vec{r}_0 \cdot \vec{n} \quad \Rightarrow \quad -x - \frac{2}{3}y + z = -2 \quad (709)$$

## 6.8 Verallgemeinerte Kettenregel

Gegeben sei eine Funktion  $f(x, y, z)$  mit  $x = x(t)$ ,  $y = y(t)$ ,  $z = z(t)$ , d.h.  $f$  hängt über  $x, y, z$  mittelbar von nur einer einzigen Variablen  $t$  ab. (Stetige Differenzierbarkeit all dieser Funktionen sei hier vorausgesetzt.) Gesucht ist nun die erste Ableitung  $df/dt$ .

Dazu können wir zunächst das totale Differential von  $f$  in den Variablen  $x, y, z$  notieren:

$$df = \vec{\nabla} f \cdot d\vec{r} = \vec{\nabla} f \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} dt \quad (710)$$

Im zweiten Schritt wurde dabei formal mit  $dt$  erweitert, was strenger ausgedrückt einer Variablentransformation von  $x, y, z$  auf  $t$  entspricht. Division dieser Gleichung auf beiden Seiten durch  $dt$  und Auswertung des Skalarprodukts liefert:

$$\frac{df}{dt} = \vec{\nabla} f \cdot \frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{dz}{dt} \quad (711)$$

Dies können wir auffassen als eine erste Verallgemeinerung der Kettenregel auf Funktionen von mehreren Variablen oder als Vorschrift zur Ableitung mittelbarer Funktionen.

Zu einer weiteren Verallgemeinerung gelangen wir, wenn die Variablen  $x, y, z$  nicht nur von einer Variablen  $t$ , sondern von mehreren Variablen abhängen, z.B.  $s$  und  $t$  (höherdimensionale Fälle folgen analog).  $f$  ist dann mittelbare Funktion der beiden Variablen  $s$  und  $t$ , und wir suchen die ersten Ableitungen  $\partial f / \partial s$  sowie  $\partial f / \partial t$  (die nun natürlich partielle Ableitungen sind).

Ähnlich wie oben können wir zunächst das totale Differential von  $f$  aufschreiben:

$$df = \vec{\nabla} f \cdot d\vec{r} = \vec{\nabla} f \cdot \left( \frac{\partial \vec{r}}{\partial s} ds + \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} dt \right) \quad (712)$$

$$df = \frac{\partial f}{\partial s} ds + \frac{\partial f}{\partial t} dt \quad (713)$$

In der ersten Zeile wurde dabei  $f$  als Funktion von  $x, y, z$  aufgefaßt und dafür das totale Differential genommen; im zweiten Schritt wurde  $d\vec{r}$  seinerseits als totales Differential (in  $s$  und  $t$ ) geschrieben. In der zweiten Zeile wurde  $f$  als Funktion von  $s$  und  $t$  aufgefaßt und wiederum als totales Differential notiert. Natürlich muß sich in beiden Fällen dasselbe ergeben, sodaß wir einen Koeffizientenvergleich der Vorfaktoren von  $ds$  und  $dt$  machen können. Dadurch erhalten wir:

$$\frac{\partial f}{\partial s} = \vec{\nabla} f \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial s} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial s} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial s} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial s} \quad (714)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \vec{\nabla} f \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial z} \frac{\partial z}{\partial t} \quad (715)$$

(Im Gegensatz zum obigen Fall Gl. 711 sind hier alle Ableitungen partiell, was auch konsistent ist. Ansonsten ist die Form sehr ähnlich und leicht zu merken.)

## 6.9 Implizites Ableiten

Das totale Differential von Funktionen mehrerer Variabler eröffnet auch eine Möglichkeit, lediglich implizit gegebene Funktionen abzuleiten. Bereits in Abschnitt 3.1 hatten wir angemerkt, daß eine Funktion von einer Variablen nicht explizit als  $y = f(x)$  gegeben sein muß, sondern auch implizit definiert sein könnte, als  $F(x, y) = 0$ . Sofern diese implizite Beziehung eine eindeutige Abbildung von  $x$  auf  $y$  darstellt (was in impliziter Form nicht direkt sichtbar ist, aber auch nicht an die Auflösbarkeit nach  $y$  gebunden ist), ist es

gerechtfertigt, die Ableitung nach  $x$  nicht auf konventionellem Weg direkt zu ermitteln, sondern mit folgender alternativer Methode:

Das totale Differential von  $F(x, y) = 0$  ist nach Gl. 692 gegeben als

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy = 0 \quad (716)$$

(es ist Null, da ja bereits  $F(x, y)$  selber Null ist). Dieser Ausdruck läßt sich auflösen nach

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\frac{\partial F}{\partial x}}{\frac{\partial F}{\partial y}} \quad (717)$$

oder alternativ nach

$$\frac{dx}{dy} = -\frac{\frac{\partial F}{\partial y}}{\frac{\partial F}{\partial x}} \quad (718)$$

Man beachte, daß hier die Ableitung  $dx/dy$  der Kehrwert der Ableitung  $dy/dx$  ist, was sich bereits mit Gl. 380 bei der Ableitung der Umkehrfunktion ergeben hatte (s.S. 63).

Als Beispiel betrachten wir die Gleichung einer Ellipse:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} = 1 \quad (719)$$

Beim konventionellen Vorgehen müßte diese implizite Beziehung zunächst nach  $y$  aufgelöst werden, um einen expliziten Ausdruck für  $y$  zu erhalten:

$$y = \pm b \sqrt{1 - \frac{x^2}{a^2}} \quad (720)$$

Eindeutigkeit ist hier nur durch eine Fallunterscheidung der beiden Vorzeichen ( $\pm$ ) herstellbar. Normales Durchführen der Ableitung liefert aber in beiden Fällen:

$$y' = \pm b \cdot \frac{1}{2} \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right)^{-1/2} \left(-\frac{2x}{a^2}\right) = -\frac{b^2 x}{a^2 y} \quad (721)$$

Die beiden unterschiedlichen Vorzeichen verbergen sich im letzten Ausdruck in  $y$  selber, sodaß die Ableitung tatsächlich wieder ohne Fallunterscheidung eindeutig ist. Dasselbe Resultat ergibt sich auch durch implizite Ableitung des Ausdrucks Gl. 719 nach Gl. 717. Mit Hilfe der beiden partiellen Ableitungen von  $F$

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{2x}{a^2} \quad , \quad \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{2y}{b^2} \quad (722)$$

erhalten wir durch Einsetzen in Gl. 717 sofort:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{b^2 x}{a^2 y} \quad (723)$$

Offensichtlich ist hier der zweite Berechnungsweg einfacher, da keine Ableitung einer Wurzelfunktion zu bilden ist. Vielleicht wichtiger ist jedoch, daß die implizite Ableitung auch dann gebildet werden kann, wenn eine Auflösung der impliziten Funktion in einen expliziten Ausdruck nicht möglich ist.



Völlig analog kann in höherdimensionalen Fällen vorgegangen werden, z.B. bei drei unabhängigen Variablen: Der implizite Ausdruck  $F(x, y, z) = 0$  kann implizit abgeleitet werden und liefert genauso wie oben:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = -\frac{\frac{\partial F}{\partial x}}{\frac{\partial F}{\partial y}} \quad (724)$$

Im Unterschied zu Gl. 717 ist hier der Differentialquotient auf der linken Seite korrekterweise als partielle Ableitung zu schreiben. Genauso erhalten wir:

$$\frac{\partial y}{\partial z} = -\frac{\frac{\partial F}{\partial z}}{\frac{\partial F}{\partial y}} \quad (725)$$

und weitere ähnliche Ausdrücke. Zu beachten ist hier jedoch, daß  $\partial x/\partial y$  nicht mehr notwendigerweise der Kehrwert von  $\partial y/\partial x$  sein muß (wie generell bei partiellen Ableitungen), jedenfalls nicht bei naiver Vorgehensweise und/oder unvollständiger Notation.

Dazu betrachten wir als Beispiel den Zusammenhang zwischen kartesischen Koordinaten und Polarkoordinaten:

$$x = r \cos \vartheta \quad (726)$$

$$y = r \sin \vartheta \quad (727)$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2} \quad (728)$$

$$\vartheta = \arctan(y/x) \quad (729)$$

Gesucht sei die partielle Ableitung  $\partial \vartheta/\partial x$ . Korrekt ist dies mit Hilfe der Kettenregel aus Gl. 729 zu berechnen:

$$\frac{\partial \vartheta}{\partial x} = \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \left(-\frac{y}{x^2}\right) = \frac{x^2}{x^2 + y^2} \left(-\frac{y}{x^2}\right) = \frac{-y}{r^2} \quad (730)$$

(wobei im letzten Schritt Gl. 728 lediglich zur Abkürzung verwendet wurde). Scheinbar leichter wäre die Berechnung von  $\partial x/\partial \vartheta$  aus Gl. 726 mit anschließender Inversion. Wir erhalten:

$$\frac{\partial x}{\partial \vartheta} = -r \sin \vartheta = -y \quad (731)$$

Dies ist jedoch offensichtlich nicht der Kehrwert des in Gl. 730 erhaltenen Resultats.

Der Fehler liegt darin, daß bei partieller Ableitung die jeweils anderen Variablen als konstant angenommen werden – bei den beiden hier gegebenen Berechnungswegen sind aber jeweils unterschiedliche Variablen stillschweigend als konstant angenommen worden:  $\partial \vartheta/\partial x$  nach Gl. 729 meint eigentlich  $(\partial \vartheta/\partial x)_y$ , also bei konstantem  $y$ .  $\partial x/\partial \vartheta$  nach Gl. 726 bedeutet dagegen  $(\partial x/\partial \vartheta)_r$ , also bei konstantem  $r$ . Daraus wird klar, daß im allgemeinen nicht zu erwarten ist, daß der eine Ausdruck der Kehrwert des anderen ist.

Tatsächlich *sind*  $(\partial \vartheta/\partial x)_y$  und  $(\partial x/\partial \vartheta)_y$  Kehrwerte voneinander. Für die Berechnung der letzteren Ableitung ist jedoch zunächst  $x$  als Funktion von  $\vartheta$  und  $y$  auszudrücken (anstatt als Funktion von  $r$  und  $\vartheta$ ). Dies ist möglich z.B. durch Division von Gl. 726 durch Gl. 727; wir erhalten:

$$x = y \cot \vartheta \quad (732)$$

Aus dieser Beziehung Gl. 732 läßt sich nun die gewünschte Ableitung direkt bilden:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \vartheta}\right)_y = \frac{-y}{\sin^2 \vartheta} \quad (733)$$

Mit Gl. 727 wird daraus:

$$\left(\frac{\partial x}{\partial \vartheta}\right)_y = \dots = \frac{-y}{y^2/r^2} = -\frac{r^2}{y} = \frac{1}{\left(\frac{\partial \vartheta}{\partial x}\right)_y} \quad (734)$$

und wir erhalten tatsächlich den Kehrwert des Resultats aus Gl. 730.

## 6.10 Mehrdimensionale Taylorentwicklung

Auch Funktionen von mehreren Variablen lassen sich in Taylorreihen entwickeln. Als Beispiel sei hier lediglich eine (von mehreren möglichen) Formeln für die Taylorreihe einer Funktion  $f(x, y)$  von zwei Variablen angegeben, für den Entwicklungspunkt  $(x_0, y_0)$ :

$$f(x, y) = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j!} \sum_{i=0}^j \binom{j}{i} \left. \frac{\partial^j f(x, y)}{\partial x^{j-i} \partial y^i} \right|_{\substack{x=x_0 \\ y=y_0}} (x - x_0)^{j-i} (y - y_0)^i + R_n(x, y, \eta) \quad (735)$$

Das Restglied ist gegeben durch:

$$R_n(x, y, \eta) = \frac{1}{(n+1)!} \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} \left. \frac{\partial^{n+1} f(x, y)}{\partial x^{n+1-i} \partial y^i} \right|_{\substack{x=x_0+\eta(x-x_0) \\ y=y_0+\eta(y-y_0)}} (x - x_0)^{n+1-i} (y - y_0)^i \quad (736)$$

wobei  $\eta$  in  $0 \leq \eta \leq 1$  so zu wählen ist, daß  $|R_n|$  maximal wird.

Die Formel Gl. 735 ist für  $f(x, y)$  zwar allgemein, aber etwas unübersichtlich. Einfacher nachzuvollziehen ist folgende explizite Notation aller Terme bis zur 2. Ordnung (quadratisch):

$$f(x, y) \approx f(x_0, y_0) + f_x(x_0, y_0)(x - x_0) + f_y(x_0, y_0)(y - y_0) \quad (737)$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{1}{2} f_{xx}(x_0, y_0)(x - x_0)^2 + f_{xy}(x_0, y_0)(x - x_0)(y - y_0) + \frac{1}{2} f_{yy}(x_0, y_0)(y - y_0)^2 \\ &= f(x_0, y_0) + \vec{\nabla} f(x_0, y_0) \cdot \vec{r} + \frac{1}{2} \vec{r} \cdot \mathbf{H} \vec{r} \end{aligned} \quad (738)$$

Dabei ist die letzte Zeile lediglich eine abkürzende Notation der darüberstehenden, mit dem Ortsvektor  $\vec{r} = (x - x_0, y - y_0)$ , dem aus den vorigen Abschnitten bekannten Gradientenvektor und der Hesse-Matrix  $\mathbf{H}$  der zweiten Ableitungen. Außerdem wurden folgende (übliche) Abkürzungen für (partielle) Ableitungen verwendet:

$$f_x = \frac{\partial f}{\partial x} \quad ; \quad f_{xy} = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \quad (739)$$

Wie bei Taylorreihen für Funktionen einer Variabler ist es möglich, daß andere Herleitungswege als explizite Ableitungen der Funktion nach Gl. 735 schneller sind. Zum Beispiel ergibt sich die McLaurin-Reihe für  $f(x, y) = \sin x \cos y$  bis zur 3. Ordnung sehr einfach aus Multiplikation der Standardreihen für  $\sin x$  und  $\cos y$ :

$$\sin x \cos y \approx \left(x - \frac{x^3}{3!} + \dots\right) \left(1 - \frac{y^2}{2} + \dots\right) = x - \frac{x^3}{3!} - \frac{xy^2}{2} + \dots \quad (740)$$

Ähnlich erhalten wir die McLaurin-Reihe für  $\ln(1+x-y)$  sehr leicht mit Hilfe der Substitution  $u = x - y$  aus der entsprechenden Standardtaylorreihe:

$$\begin{aligned}\ln(1+x-y) &\approx (x-y) + (x-y)^2/2 + (x-y)^3/3 + \dots \\ &= x-y - \frac{x^2}{2} + xy - \frac{y^2}{2} + \frac{x^3}{3} - x^2y + xy^2 - \frac{y^3}{3} + \dots\end{aligned}\quad (741)$$

## 6.11 Mehrdimensionale numerische Minimierung

Hier haben wir eine zunächst „unbekannte“ Funktion  $f(\vec{x})$  (die wir jedoch an einzelnen Punkten berechnen können). Von dieser Funktion suchen wir Minima, Maxima, Sattelpunkte, usw. (Wie im Abschnitt 4.8.2 reden wir in diesem Abschnitt zur Vereinfachung nur von Minimierung, obwohl alles ganz analog auch auf Maximierung übertragbar ist.)

Ein sehr wichtiges *Anwendungsbeispiel* in der Chemie ist die potentielle Energie  $V$  als Funktion der Molekülgeometrie (berechnet mit ab-initio-Methoden, semiempirischen Methoden, Kraftfeldern, ...). Dann sind

- Minima = (meta)stabile Moleülkonfigurationen;
- Sattelpunkte 1. Ordnung = (mögliche) Übergangszustände chemischer Reaktionen.

Daher sind multidimensionale Optimierungsverfahren Teil der meisten Programmpakete der theoretischen Quantenchemie. Offensichtlich braucht man dabei hocheffiziente Varianten, weil jede einzelne Funktions-/Ableitungsberechnung extrem zeitaufwendig sein kann.

Im Unterschied zum verwandten Problem in einer Dimension (Abschnitt 4.8.2) ist im mehrdimensionalen Fall eine strikte Eingrenzung eines Minimums meist unmöglich — bereits in 2D schlicht schon deshalb, weil es ausgehend von einem Punkt unendlich viele verschiedene Richtungen weg von diesem Punkt gibt. Daher können wir in der Praxis in der Regel nicht garantieren, daß es in *alle* diese Richtungen immer nur aufwärts geht. Daher gibt es keine (exakten) hochdimensionalen Analogien zu den 1D-Intervallteilungsverfahren. Natürlich sind trotzdem alle Verfahren iterativ, d.h. sie benötigen einen (geratenen) Startpunkt.

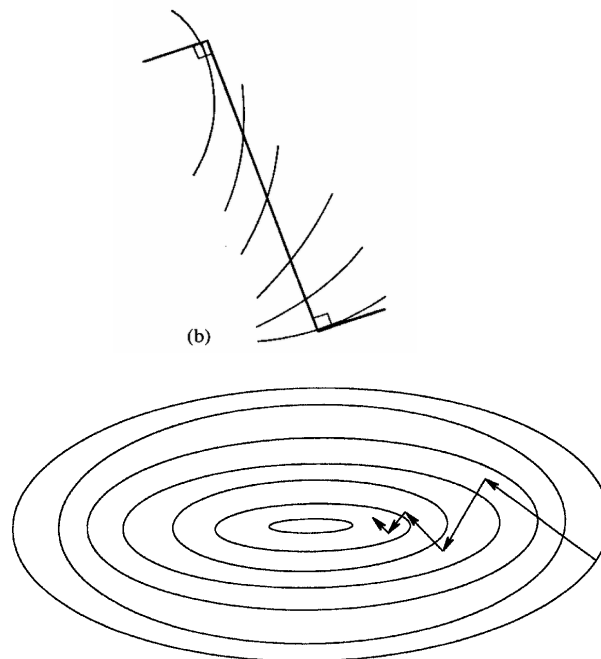
Eine 1D-Minimierung findet mit möglichst wenigen Funktionsberechnungen das Minimum in einer gegebenen Richtung (von  $a$  nach  $b$ ). Beim nD-Fall kommt ein zweites Problem hinzu: In welche Richtung sollte man überhaupt gehen?

### 6.11.1 Methode des steilsten Abstiegs

Nach den Überlegungen der Abschnitte 6.4 und 6.7 liegt es zunächst nahe, den entgegengesetzten (negativen) Gradientenvektor als Schrittrichtung zu verwenden, da dies die Richtung des steilsten Abstiegs im jeweiligen Punkt ist. In dieser Richtung kann man dann solange weitergehen, bis sich der Abstieg in einen Anstieg umkehrt, bis man also ein Minimum entlang dieser vorgegebenen, eindimensionalen Richtung gefunden hat. Da ein mehrdimensionales Problem vorliegt, ist dieses Minimum auf der mehrdimensionalen Fläche i.A. noch kein echtes Minimum, sondern lediglich ein Krümmungspunkt auf einem Abhang. Daher muß iteriert werden:

1. Gegeben sei ein Startpunkt  $\vec{x}_i, i = 1$ , im Suchraum.
2. Berechne den Gradienten  $\vec{g}_i = \nabla f(\vec{x}_i)$ ; die Richtung des steilsten Abstiegs ist dann gegeben durch  $-\vec{g}_i$ .
3. Verwende einen beliebigen 1D-Minimierungsalgorithmus, um in dieser Richtung das Minimum zu finden.
4. Wenn  $\text{abs}(f(\vec{x}_i) - f(\vec{x}_{i-1}))$  kleiner als eine gegebene Toleranz, stop.
5. Sonst:  $i \leftarrow i + 1$
6. Gehe zu (2).

Da in jedem Schritt eine 1D-Minimierung erfolgt, geht es in jedem Schritt abwärts. Deshalb ist diese Methode sehr robust, d.h. in der Praxis in aller Regel erfolgreich. Ein wesentlicher Nachteil ergibt sich jedoch ebenfalls aus Abschnitt 6.7: In jedem Punkt steht der Gradientenvektor senkrecht auf der Niveauläche durch diesen Punkt. Dies ist als Startrichtung gut, da es die Richtung des steilsten Abstiegs ist. Wenn wir jedoch entlang dieser Richtung solange weitergehen, bis wir ein 1D-Minimum gefunden haben, ist dies zwangsläufig der Punkt, an dem wir uns auf einer Tangentialebene zur dortigen Niveauläche befinden (da bei infinitesimalen Vorwärts-/Rückwärtsschritten der Funktionswert gleich bleibt = Minimum, 1. Ableitung Null). Bei der nächsten Iteration gehen wir aber wieder senkrecht zu dieser Niveauläche weiter. Sukzessive Schrittrichtungen stehen also per Konstruktion aufeinander senkrecht. Dies führt jedoch im allgemeinen nicht direkt zum Minimum bzw. ist schon an einfache Funktionsformen schlecht angepaßt:



**Figure 14.1** Steepest descent minimization

Gleichzeitig ist jede hier als Einzelschritt gezeigte Iteration eine 1D-Minimierung, die nach Abschnitt 4.8.2 ihrerseits ein längerer iterativer Prozeß ist. Verzichtet man auf die 1D-Minimierung, verliert man jedoch sowohl die Konvergenzgarantie bzw. Robustheit als auch (in Ermangelung von Vorinformation über die Funktion) jegliche Vorstellung darüber, wie weit man in jede 1D-Richtung laufen sollte.

### 6.11.2 Richtungs-/Newton-Methoden

Wie im eindimensionalen Fall (siehe Abschnitte 4.8.1 und 4.8.2) ist es sowohl vorteilhaft als auch potentiell gefährlich, weitere Information über die zu minimierende Funktion in Form ihrer Ableitung(en) bei der Minimierung zu berücksichtigen. Eine Standardmethode bei mehrdimensionalen Funktionen ist die Approximation der unbekannten Funktion durch eine quadratische Form im Sinne einer mehrdimensionalen Taylorreihe (Abschnitt 6.10), was zwar sehr allgemein ist, aber je nach Funktionsverlauf möglicherweise nur in einer kleinen Umgebung des betrachteten Punktes hinreichend gut:

$$f(\vec{x}) = c - \vec{g} \cdot \vec{x} + \frac{1}{2} \vec{x} \cdot \mathbf{A} \vec{x} + \dots \quad (742)$$

$$\text{mit Gradient } \vec{b} = -\nabla f|_{\vec{x}_0} \quad \text{und Hessescher Matrix } \mathbf{A} \text{ mit } A_{ij} = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{\vec{x}_0} \quad (743)$$

Der Vektor  $\vec{x}$  ist hier eine Abkürzung für den Schrittvektor  $x_{i+1} - x_i$  im mehrdimensionalen Fall. Diese lokale quadratische Näherung wird traditionell in zwei verschiedenen Weisen verwendet:

**A)** Mit Abbruch nach dem quadratischen Glied ist der Gradient gegeben durch (Ableitung von Gl. 478 nach  $\vec{x}$ ):

$$\nabla f = \mathbf{A} \vec{x} - \vec{b} \quad (744)$$

Im Minimum  $\vec{x}_m$  dieser Approximation ist der Gradient Null, also gilt dort:

$$\mathbf{A} \vec{x}_m = \vec{b} \quad (745)$$

An allen anderen Punkten  $\vec{x}_i$  gilt nach Gl. 744:

$$\mathbf{A} \vec{x}_i = \nabla f|_{\vec{x}_i} + \vec{b} \quad (746)$$

Gln. 745 und 746 zusammen lauten also:

$$\vec{x}_i - \vec{x}_m = \mathbf{A}^{-1} \nabla f|_{\vec{x}_i} \quad (747)$$

Innerhalb der quadratischen Approximation an  $f(\vec{x})$  liefert Gl. 747 eine Vorschrift, wie man von einem beliebigen Startpunkt  $\vec{x}_i$  in *einem* Schritt das Minimum  $\vec{x}_m$  finden kann. Dies ist der sogenannte *Newton-Schritt*. Dazu müssen wir allerdings die Hesse-Matrix (exakt!) kennen, machen aber auch dann einen Fehler, weil die quadratische Form nur eine lokale Approximation an die eigentliche zu minimierende Funktion ist.

**B)** Statt der zueinander senkrechten Schrittvektoren des steilsten Abstiegs

$$\vec{x}_i \cdot \vec{x}_{i+1} = 0 \quad (748)$$

können wir sogenannte zueinander *konjugierte* Richtungen verwenden:

$$\vec{x}_i \cdot \mathbf{A} \vec{x}_{i+1} = 0 \quad (749)$$

$n$  Schritte entlang konjugierter Richtungen (mit jeweils einer 1D-Minimierung) führen in  $n$  Dimensionen exakt ins Minimum der approximativen quadratischen Form.

Dementsprechend unterscheidet man zwei Hauptklassen von Verfahren:

**quasi-Newton (variable metric):** Wir starten mit einer geratenen Hesse-Matrix und machen Newton-artige Schritte; die dabei gewonnene Information über die Funktion wird zur Korrektur der Hesse-Matrix verwendet.

**Richtungsmethoden (conjugate gradient u.a.):** Mit sehr viel Raffinesse ist es möglich, Schritte in zueinander konjugierte Richtungen zu machen und dabei die Hesse-Matrix indirekt zu berücksichtigen, ohne sie jemals explizit berechnen zu müssen.

Bei quasi-Newton-Verfahren muß also die Hesse-Matrix abgespeichert werden, was bei hochdimensionalen Problemen (z.B. Strukturoptimierung von Proteinen mit Kraftfeldmethoden) schwierig werden kann; dort werden bevorzugt Richtungsmethoden verwendet. In anderen Fällen sind quasi-Newton-Verfahren evtl. etwas besser; z.B. gibt es spezielle Varianten, die keine exakten 1D-Minimierungen entlang jeder Richtung benötigen.

Wie bei der Extremwertsuche in einer Dimension finden all diese Verfahren auch Sattelpunkte erster und höherer Ordnung – aufgrund numerischer Instabilitäten aber nur, wenn der Startpunkt nahe genug am Sattelpunkt liegt.

Alle diese Verfahren finden nur den Extremwert, in dessen Einzugsbereich der Startpunkt liegt, und enden dort. Eine systematische Suche z.B. nach den energetisch tiefstliegenden Molekülkonfigurationen erfordert Methoden, die solchen lokalen Minima „entkommen“ können und mehr oder weniger gezielt globale Minima finden.

## 6.12 Extremwerte ohne Nebenbedingungen

Gegeben sei eine Funktion  $F(x, y, z)$ ; gesucht sind Extremwerte dieser Funktion (Analoges gilt natürlich für Funktionen von zwei oder von vier oder mehr Variablen). Wie in Abschnitt 6.5 gezeigt, können wir das totale Differential bilden:

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x} dx + \frac{\partial F}{\partial y} dy + \frac{\partial F}{\partial z} dz \quad (750)$$

Es gibt die Änderung des Funktionswerts an, wenn die Koordinaten um  $dx$ ,  $dy$  und  $dz$  geändert werden. Ein Extremwert von  $F$  liegt offenbar vor, wenn  $dF = 0$  gilt. Weil die Koordinaten  $x$ ,  $y$  und  $z$  per Definition voneinander unabhängig sind, sind auch die Werte  $dx$ ,  $dy$  und  $dz$  unabhängig voneinander. Daher ist  $dF = 0$  in Gl. 750 nur erzielbar, wenn alle partiellen Ableitungen von  $F$  jeweils für sich genommen aber gleichzeitig Null sind (oder zusammenfassend: der Gradientenvektor):

$$\frac{\partial F}{\partial x} = 0 \quad , \quad \frac{\partial F}{\partial y} = 0 \quad , \quad \frac{\partial F}{\partial z} = 0 \quad , \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\nabla} F = \vec{0} \quad (751)$$

In Analogie zur bekannten Vorgehensweise bei Funktionen einer Variabler sind auch hier Maxima, Minima und Sattelpunkte dadurch unterscheidbar, daß man höhere Ableitungen betrachtet, hier speziell die Hessesche Matrix der zweiten Ableitungen:

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x^2} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial x \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2}{\partial y^2} & \frac{\partial^2}{\partial y \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z \partial x} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial y} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix} F(x, y, z) \quad (752)$$

Wenn alle drei Eigenwerte von  $H$  negativ sind, liegt ein Maximum vor. Sind alle drei Eigenwerte positiv, liegt ein Minimum vor. Bei Eigenwerten mit unterschiedlichen Vorzeichen handelt es sich um einen Sattelpunkt. (Eigenwerte von Matrizen werden in MfC2 behandelt.)

Beispiel: siehe Vorlesung ♣

## 6.13 Extremwerte mit Nebenbedingungen

In der Praxis ist es häufig der Fall, daß eine Suche nach Extremwerten von  $F(x, y, z)$  noch durch eine oder mehrere *Nebenbedingungen* (*constraints*) eingeschränkt wird. Gesucht ist dann ein Extremwert von  $F(x, y, z)$  unter der Bedingung, daß gleichzeitig  $g(x, y, z) = 0$  gilt (der Fall mehrerer Nebenbedingungen ist analog). Man beachte dabei von vornherein, daß Extrema mit und ohne Nebenbedingungen im allgemeinen *nicht* dieselben sein werden.

Der entscheidende Unterschied zur Behandlung der Extremwertbestimmung ohne Nebenbedingungen (Abschnitt 6.12) ist, daß die Gleichung  $g(x, y, z) = 0$  bewirkt, daß die Variablen  $x$ ,  $y$  und  $z$  (und damit auch die Differentiale  $dx$ ,  $dy$  und  $dz$ ) nicht mehr unabhängig voneinander sind. Dementsprechend besteht eine erste Möglichkeit zur Lösung auch darin, die Nebenbedingung  $g(x, y, z) = 0$  nach eine der Variablen  $x$ ,  $y$  oder  $z$  aufzulösen. Die resultierende Beziehung kann dann verwendet werden, diese Variable aus  $F$  zu eliminieren. Dadurch erhält man eine Extremwertbestimmung ohne Nebenbedingung, mit einer um eins reduzierten Anzahl von Variablen. Wenn die Nebenbedingung  $g(x, y, z) = 0$  nicht explizit nach einer der Variablen auflösbar ist, ist ein ähnlicher Weg trotzdem gangbar, wenn man die Methode der impliziten Ableitung wählt (siehe Abschnitt 6.9).

Alternativ dazu kann man auch die *Methode der Lagrangeschen Multiplikatoren* verwenden. Sie leistet nicht prinzipiell mehr oder weniger als die beiden im vorigen Absatz genannten Methoden der Variablenelimination bzw. der impliziten Differentiation, vereinfacht aber in der Praxis die Rechnung u.U. erheblich, insbesondere bei höheren Anzahlen von Variablen und/oder Nebenbedingungen.

Bei dieser Methode wird formal eine erweiterte Funktion  $G$  konstruiert:

$$G(x, y, z, \lambda) = F(x, y, z) + \lambda g(x, y, z) \quad (753)$$

wobei  $\lambda$  ein zunächst unbestimmter Faktor ist (eben der Lagrange-Multiplikator). Dann können wir das totale Differential von  $G$  hinschreiben als:

$$dG = \frac{\partial G}{\partial x} dx + \frac{\partial G}{\partial y} dy + \frac{\partial G}{\partial z} dz + \frac{\partial G}{\partial \lambda} d\lambda \quad (754)$$

$$= \left( \frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x} \right) dx + \left( \frac{\partial F}{\partial y} + \lambda \frac{\partial g}{\partial y} \right) dy + \left( \frac{\partial F}{\partial z} + \lambda \frac{\partial g}{\partial z} \right) dz + g d\lambda \quad (755)$$

$$= dF + \lambda dg + g d\lambda \quad (756)$$

$$= dF + \lambda dg \quad (757)$$

Dabei wurde im letzten Schritt  $g = 0$  verwendet (also die Nebenbedingung), sowie im vorletzten Schritt das totale Differential von  $g$  als Abkürzung:

$$dg = \frac{\partial g}{\partial x} dx + \frac{\partial g}{\partial y} dy + \frac{\partial g}{\partial z} dz \quad (758)$$

Formal könnte man nun argumentieren, daß wegen  $g = 0$  auch  $dg = 0$  gilt, sodaß sich  $dF$  durch die Addition von  $dg$  in Gl. 757 nicht verändert (Addition von Null) und die Bedingungen  $dF = 0$  und  $dg = 0$  erfüllt sind, wenn  $dG = 0$  gilt. Instruktiver ist jedoch eigentlich eine andere Betrachtungsweise: Wie oben bereits konstatiert, sind durch die Nebenbedingung die Variablen  $x$ ,  $y$  und  $z$  nicht mehr unabhängig voneinander. Deswegen können wir hier (im Gegensatz zu Abschnitt 6.12!) aus  $dG = 0$  und Gl. 755 zunächst *nicht* folgern, daß die drei Klammerausdrücke vor  $dx$ ,  $dy$  und  $dz$  jeweils einzeln für sich Null sein müssen – bei einer Nebenbedingung sind eben nur zwei dieser drei Differentiale unabhängig voneinander. An dieser Stelle kommt uns jedoch der Lagrange-Multiplikator  $\lambda$  zu Hilfe: Wir können fordern, daß dieser zunächst unbestimmte Faktor so gewählt werden soll, daß auch der dritte Klammerausdruck Null wird.

Mit dieser Zusatzüberlegung ergeben sich aus  $dG = 0$  und Gl. 755 also doch wieder folgende Forderungen:

$$\frac{\partial F}{\partial x} + \lambda \frac{\partial g}{\partial x} = 0 \quad (759)$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} + \lambda \frac{\partial g}{\partial y} = 0 \quad (760)$$

$$\frac{\partial F}{\partial z} + \lambda \frac{\partial g}{\partial z} = 0 \quad (761)$$

$$g = 0 \quad (762)$$

Das sind vier Bestimmungsgleichungen für die vier Unbekannten:  $x, y, z$ -Werte im Extremum, sowie  $\lambda$  (wobei  $\lambda$  wie gezeigt ein formales Artefakt ist, dessen Wert in den meisten Fällen nicht interessiert).

Beispiele: siehe Vorlesung ♣

Beim Vorliegen mehrerer Nebenbedingungen kann man formal genauso vorgehen: Jede Nebenbedingung wird in homogene Form gebracht, also etwa  $g_1(x, y, z) = 0$  und  $g_2(x, y, z) = 0$ , und dann mit jeweils einem eigenen Lagrange-Multiplikator zur eigentlichen Funktion addiert, also  $G = F + \lambda_1 g_1 + \lambda_2 g_2$ . Die partiellen Ableitungen dieses erweiterten Ausdrucks  $G$  werden wieder einzeln Null gesetzt und ergeben zusammen mit den Nebenbedingungen die Bestimmungsgleichungen für die Extremwertkoordinaten (und für alle Lagrange-Multiplikatoren).