

Mathematik für Chemiker

Dieter Bothe

Hermann Hembd

Norbert Köckler

WS 2004/2005 – Nochmal vollständig durchgesehen (1.1.2005)

Inhaltsverzeichnis

Bezeichnungen	V
1 Grundbegriffe	1
1.1 Aussagen	1
1.2 Mengen und Zahlen	2
1.3 Elementare Beweismethoden	4
1.3.1 Direkter Beweis	4
1.3.2 Indirekter Beweis	5
1.3.3 Vollständige Induktion	5
1.4 Binominalkoeffizienten	7
1.4.1 Fakultät und Binominalkoeffizient	7
1.4.2 Binomische Formeln und Pascal'sches Δ	8
1.5 Ungleichungen und Beträge	8
2 Rechentechniken	13
2.1 Potenzen	13
2.1.1 Exponentielle Schreibweise, normalisierte Gleitpunktdarstellung	13
2.1.2 Multiplikation und Division	14
2.1.3 Potenzieren und Wurzelziehen	15
2.1.4 Addition und Subtraktion	15
2.2 Logarithmen	16
2.2.1 Definition und erste Eigenschaften	16
2.2.2 Graphische Darstellung des Logarithmus	17
2.2.3 Natürlicher Logarithmus	18
2.3 Algebraische Gleichungen	19
2.3.1 Eine Gleichung mit einer Variablen	20
2.3.2 Gleichungssysteme	23
3 Funktionen	29
3.1 Funktion und Umkehrfunktion	29
3.2 Komplexe Zahlen und trigonometrische Funktionen	36
3.3 Ausgleichsrechnung: Lineare Regression	43

4	Folgen und Grenzwerte	47
4.1	Folgen	47
4.2	Konvergenz von Folgen	48
4.3	Grenzwertsätze	50
4.4	Reihen	52
4.5	Konvergenzkriterien für Reihen	54
4.6	Grenzwerte von Funktionen und Stetigkeit	56
5	Differentiation	59
5.1	Tangente und Ableitung	59
5.2	Differentiationsregeln	63
5.3	Mittelwertsatz (der Differentialrechnung)	66
5.4	Extrema und Wendepunkte	69
5.5	Das Newton'sche Iterationsverfahren	70
6	Integration	73
6.1	Das bestimmte Integral	73
6.2	Eigenschaften des bestimmten Integrals	75
6.2.1	Rechenregeln	75
6.2.2	Flächeninhalt	76
6.2.3	Mittelwertsatz der Integralrechnung	76
6.3	Zusammenhang zwischen Differential- und Integralrechnung	77
6.4	Integrationsmethoden	78
6.4.1	Partielle Integration (Produktregel)	78
6.4.2	Substitution (Kettenregel)	79
6.4.3	Einige Standardsubstitutionen	80
6.4.4	Partialbruchzerlegung	82
6.5	Uneigentliche Integrale	85
6.5.1	Unbeschränkter Integrationsbereich	85
6.5.2	Unbeschränkter Integrand	87
6.6	Numerische Integration	88
6.6.1	Newton-Cotes-Formeln	89
7	Elemente der linearen Algebra	91
7.1	Der euklidische Raum \mathbb{R}^n	91
7.2	Lineare Unabhängigkeit	93
7.3	Lineare Abbildungen und Matrizen	96
7.4	Lineare Gleichungssysteme	102
7.5	Determinanten	105

7.6	Der Gauß-Algorithmus	109
7.6.1	Beispielhafte Durchführung (nach Schwarz: <i>Numerische Mathematik</i>) . . .	111
7.6.2	Mehrere rechte Seiten. Matrixinversion	113
7.6.3	Algorithmus: Berechnung von $\det A$	114
7.7	Kleinste Quadrate	114
7.7.1	Problemstellung	114
7.7.2	Beispiel	115
8	Gewöhnliche Differentialgleichungen	117
8.1	Erste Beispiele und Begriffe	117
8.2	DGLen mit getrennten Variablen	120
8.3	Lineare DGLen 1. Ordnung	123
8.4	Lineare Differentialgleichungen 2. Ordnung	126
8.5	Lineare Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung	131

Bezeichnungen

$A \wedge B$	A und B
$A \vee B$	A oder B
$A \Rightarrow B$	Aus A folgt B
$A \Leftrightarrow B$	Die Aussagen A und B sind gleichwertig
\neg	nicht
$\{\dots\}$	Mengenklammern
\in	ist Element von
\notin	ist nicht Element von
\emptyset	leere Menge
\subset	Teilmenge
\cup	vereinigt mit
\cap	geschnitten mit
$=$	gleich
\neq	ungleich
\approx	ungefähr gleich
$<$	kleiner als
\leq	kleiner als oder gleich
$>$	größer als
\geq	größer als oder gleich
$A \setminus B$	A ohne B
$A \times B$	Kartesisches Produkt von A und B
\mathbb{N}	Menge der natürlichen Zahlen
\mathbb{Z}	Menge der ganzen Zahlen
\mathbb{R}	Menge der reellen Zahlen
\mathbb{Q}	Menge der rationalen Zahlen
\mathbb{C}	Menge der komplexen Zahlen
o.E.	ohne Einschränkung
\forall	für alle
\exists	es gibt
\sum	Summenzeichen
\prod	Produktzeichen
$n!$	n Fakultät
$\binom{n}{k}$	n über k (Binomialkoeffizient)
$\sqrt{}$	Quadratwurzel
$\sqrt[n]{}$	n -te Wurzel

\mathbb{L}	Lösungsmenge
$[a, b]$	abgeschlossenes Intervall
(a, b)	geordnetes Paar oder offenes Intervall
$]a, b[$	offenes Intervall
$[a, b)$	(rechts) halb offenes Intervall
$(a, b]$	(links) halb offenes Intervall
$ x $	Betrag von x
sgn	signum (Vorzeichen)
\log	Logarithmus (auch \lg)
\ln	Natürlicher Logarithmus
e^x	Exponentialfunktion
$P(x)$	Polynom
\sinh	Sinus hyperbolicus
\cosh	Cosinus hyperbolicus
$\begin{vmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{vmatrix}, \det$	Determinante
$\begin{pmatrix} \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}$	Matrix
\vec{a}	Vektor
$\vec{a} \times \vec{b}$	Vektorprodukt
$f(x)$	Funktionswert (f von x)
$\frac{df}{dx}$	1. Ableitung (df nach dx)
D_f	Definitionsbereich von f
W_f	Wertebereich von f
D_{\max}	maximaler Definitionsbereich
$gr(f)$	Graph von f
f^{-1}	Umkehrfunktion von f
$Re\ z$	Realteil von z
$Im\ z$	Imaginärteil von z
i	imaginäre Einheit
\bar{z}	konjugiert komplexe Zahl
$\arg(z)$	Argument von z
\sin	Sinus
\cos	Cosinus
\tan	Tangens
\cot	Kotanges
\arcsin	Arkussinus
\arccos	Arkuscosinus
\arctan	Arkustangens

Kapitel 1

Grundbegriffe

1.1 Aussagen

In der Mathematik werden nur solche Aussagen betrachtet, die entweder wahr (w) oder falsch (f) sind. Eine dritte Möglichkeit wird nicht zugelassen.

Beispiele 1.1.1:

- (i) A_1 : 3 ist eine ungerade Zahl; Wahrheitswert: w
- (ii) A_2 : Die Erde ist eine Scheibe; Wahrheitswert: f
- (iii) A_3 : Guten Morgen; keine Aussage i.o. Sinn

Logische Verknüpfungen von Aussagen:

1. *Konjunktion* („und“), Abkürzung: \wedge

$A_1 \wedge A_2$ bedeutet: Es gilt A_1 *und* A_2 , genauer: Die Aussage $A_1 \wedge A_2$ ist genau dann (dann und nur dann) wahr, falls A_1 wahr ist *und* A_2 wahr ist.

Beispiel 1.1.2: A_1 : 3 ist ungerade. A_4 : 3 ist eine Primzahl. Dann gilt $A_1 \wedge A_4$ ist wahr.

2. *Disjunktion* („oder“), Abkürzung: \vee

$A_1 \vee A_2$ bedeutet: Es gilt A_1 *oder* A_2 .

Beachte: $A_1 \vee A_2$ heißt nicht „entweder A_1 oder A_2 “, sondern im Sinne von „und/oder“.

Beispiel 1.1.3: $A_1 \vee A_2$: 3 ist ungerade Zahl oder die Erde ist eine Scheibe (wahr).

3. *Negation* („nicht“, Verneinung), Abkürzung: \neg

Beispiel 1.1.4: $\neg A_1$: 3 ist keine ungerade Zahl (falsch).

Beachte: inkorrekt wäre „ $\neg A_1$: 3 ist eine gerade Zahl“!

4. *Implikation* („wenn ... dann“, Folgerung), Abkürzung: \Rightarrow

Beispiel 1.1.5: A_5 : n ist eine gerade Zahl. A_6 : n^2 ist eine gerade Zahl. Dann gilt: $A_5 \Rightarrow A_6$.

Bemerkungen 1.1.6:

- (i) A_5 , A_6 sind strenggenommen keine Aussagen, sondern sogenannte Aussageformen. Sie erhalten erst dann einen festen Wahrheitswert, wenn für n eine bestimmte Zahl eingesetzt wird! Dennoch ist „ $A_5 \Rightarrow A_6$ “ stets wahr.
- (ii) Sprechweisen für „ $A \Rightarrow B$ “ sind: Aus A folgt B , A impliziert B , A ist hinreichend für B , B ist notwendig für A .
- (iii) A falsch, dann $A \Rightarrow B$ immer wahr!
„Wenn die Erde eine Scheibe ist, dann ist der Mond fünfeckig“
- (iv) Aus $A \Rightarrow B$ folgt *nicht* $B \Rightarrow A$!

Beispiel 1.1.7: A : Es regnet, B : Die Straße ist nass.

5. *Äquivalenz* („genau dann ... wenn“), Abkürzung: \Leftrightarrow

Beispiel 1.1.8: A : Die Zahlen a und b sind ungerade. B : Das Produkt $a \cdot b$ ist ungerade. Dann gilt: $A \Leftrightarrow B$.

Bemerkungen 1.1.9:

- (i) Sprechweise: A und B sind äquivalent, A ist notwendig und hinreichend für B .
- (ii) $A \Leftrightarrow B$ ist gleichbedeutend mit $(A \Rightarrow B) \wedge (B \Rightarrow A)$.

Eine strenge Definition dieser Verknüpfungen ist mittels folgender Wahrheitstafel möglich:

A	B	$\neg A$	$A \wedge B$	$A \vee B$	$A \Rightarrow B$	$A \Leftrightarrow B$
w	w	f	w	w	w	w
w	f	f	f	w	f	f
f	w	w	f	w	w	f
f	f	w	f	f	w	w

Kontrapositionsgesetz: $(A \Rightarrow B) \Leftrightarrow (\neg B \Rightarrow \neg A)$

Beispiel 1.1.10: $(x^2 \leq 1 \Rightarrow x \leq 1) \Leftrightarrow (x > 1 \Rightarrow x^2 > 1)$

1.2 Mengen und Zahlen

Man fasst oft gewisse Objekte zu einer Gesamtheit zusammen, etwa die Einwohnerschaft PBs (= Gesamtheit aller Einwohner PBs). Eine solche Gesamtheit heißt *Menge*. Die einzelnen Objekte heißen *Elemente* der Menge. Man kann eine Menge angeben, indem man

1. alle Elemente angibt, z.B.: $M_1 = \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}$, $M_2 = \{!, ?, @\}$
2. alle Elemente durch eine Vorschrift erklärt, z.B.:

$$\begin{aligned}
 M_3 &= \{x : x \text{ ist eine ganze Zahl und } x > 10\} \\
 &= \{11, 12, 13, \dots\} \\
 &= \{x \mid x \text{ ist eine ganze Zahl, } x > 10\}
 \end{aligned}$$

Aus formalen Gründen definiert man die *leere Menge* (kurz $\{\}$ oder \emptyset), als Menge ohne Element. Ist a ein Element der Menge M , so schreibt man $a \in M$; entsprechend $a \notin M$ für „ a ist kein Element der Menge M “.

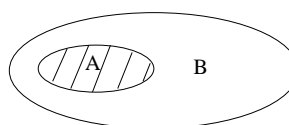
Hier: $\gamma \in M_1$, $7 \notin M_2$.

Mengenoperationen:

A heißt *Teilmenge* von B , falls jedes $a \in A$ auch zu B gehört; B heißt dann *Obermenge* von A , kurz $A \subset B$, und $B \supset A$.

$A = B$ bedeutet $A \subset B$ und $B \subset A$

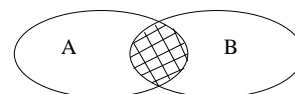
Beachte: Bei $A \subset B$ ist Gleichheit *nicht* ausgeschlossen; für $A \subset B$ und $A \neq B$ schreibt man $A \subsetneq B$ und nennt A eine *echte Teilmenge* von B .



Vereinigung: $A \cup B = \{x : x \in A \text{ oder } x \in B\}$



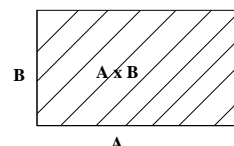
Durchschnitt: $A \cap B = \{x : x \in A \text{ und } x \in B\}$



Differenz „A ohne B“: $A \setminus B = \{x : x \in A \text{ und } x \notin B\}$



Kartesisches Produkt: $A \times B = \{(a, b) : a \in A, b \in B\}$



Dabei ist (a, b) ein geordnetes Paar, also ist die Reihenfolge wichtig: $(2, 3) \neq (3, 2)$.

Entsprechend $A \times B \times C = \{(a, b, c) : a \in A, b \in B, c \in C\}$ etc.

A und B heißen *disjunkt*, falls sie kein gemeinsames Element haben, d.h. falls $A \cap B = \emptyset$ gilt.

Die wichtigsten Mengen in der Mathematik sind die *Zahlen*. Man unterscheidet folgende Grundmengen von Zahlen:

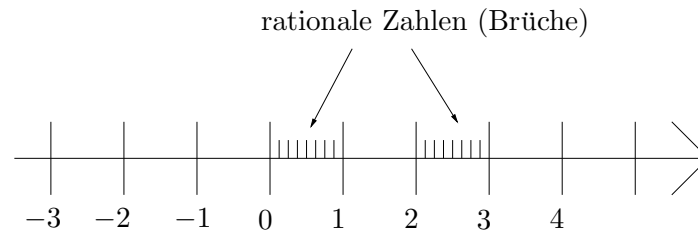
$\mathbb{N} = \{1, 2, 3, 4, \dots\}$, die *natürlichen Zahlen*

$\mathbb{N}_0 = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$, die *nichtnegativen ganzen Zahlen*

$\mathbb{Z} = \{\dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots\}$, die *ganzen Zahlen*

$\mathbb{Q} = \{\frac{p}{q} : p, q \in \mathbb{Z}, q \neq 0\}$, die *rationalen Zahlen* (Brüche)

Geometrische Darstellung durch die Zahlengerade (-strahl):



Das Rechnen mit rationalen Zahlen ist aus der Schule bekannt!

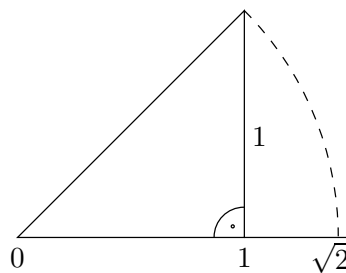
Zur Erinnerung: $\frac{a}{b} + \frac{c}{d} = \frac{ad + bc}{bd}$ $\left(\text{nicht} = \frac{a + c}{b + d} \right)$

$$\frac{a}{b} \cdot \frac{c}{d} = \frac{ac}{bd}, \quad \frac{a}{b} : \frac{c}{d} = \frac{a}{b} \cdot \frac{d}{c} = \frac{ad}{bc}$$

ungünstige Schreibweise: $2 : \frac{3}{4} = \frac{2}{\frac{3}{4}}$.

Zwar gibt es zwischen je zwei Brüchen noch beliebig viele weitere rationale Zahlen, dennoch wird die Zahlengerade *nicht* vollständig ausgefüllt!

Beispiel 1.2.1:



Die Zahl $\sqrt{2}$ (definiert durch die Beziehung: $\sqrt{2}^2 = 2$) ist nicht Element von \mathbb{Q} ; deshalb heißt $\sqrt{2}$ *irrationale* Zahl.

Die Vereinigung von \mathbb{Q} mit der Menge aller irrationalen Zahlen ergibt die Menge \mathbb{R} der *reellen* Zahlen. Die Rechenregeln sind dieselben wie in \mathbb{Q} .

Es gilt

$$\mathbb{N} \subset \mathbb{N}_0 \subset \mathbb{Z} \subset \mathbb{Q} \subset \mathbb{R}.$$

Dies sind offensichtlich jeweils echte Teilmengen.

Weniger offensichtlich ist: Die Menge der rationalen Zahlen \mathbb{Q} ist *abzählbar*, d.h. sie können durchnummeriert werden. Die Menge der reellen Zahlen \mathbb{R} ist *überabzählbar*. Insbesondere liegen zwischen je zwei verschiedenen rationalen Zahlen unendlich viele irrationale Zahlen.

1.3 Elementare Beweismethoden

1.3.1 Direkter Beweis

Voraussetzung: Aussage A

Behauptung: Aussage B

Beweis: $A \Rightarrow A_1 \Rightarrow A_2 \Rightarrow \dots \Rightarrow B$

(statt \Rightarrow ist auch \Leftrightarrow zulässig)

Beispiel 1.3.1: Wenn n eine gerade natürliche Zahl ist, dann ist auch n^2 gerade.

Beweis.

$$A : n \in \mathbb{N} \text{ ist gerade} \Leftrightarrow n = 2k \text{ für ein } k \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow n^2 = 4k^2 \Rightarrow n^2 = 2m \text{ mit } m = 2k^2 \text{ und } k \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow n^2 = 2m \text{ mit } m \in \mathbb{N} \Leftrightarrow n^2 \text{ ist gerade.} \quad \square$$

1.3.2 Indirekter Beweis

Voraussetzung: A

Behauptung: B

Beweis: $\neg B \Rightarrow C_1 \Rightarrow C_2 \Rightarrow \dots \Rightarrow \neg A$

oder $A \wedge \neg B \Rightarrow \dots \Rightarrow C \wedge \neg C$ d.h. eine falsche Aussage,
daher auch „Beweis durch Widerspruch“

Beispiel 1.3.2: $\sqrt{2} \notin \mathbb{Q}$.

Beweis.

$$A : x = \sqrt{2} \quad B : x \notin \mathbb{Q}$$

oder besser

$$A : x > 0 \text{ mit } x^2 = 2 \quad B : x \neq \frac{p}{q} \text{ für alle } p, q \in \mathbb{N}$$

$$\neg B : x = \frac{p}{q} \text{ mit } p, q \in \mathbb{N}$$

dann gilt ohne Einschränkung (kurz: o.E.): p und q teilerfremd und $x^2 = 2$

$$\Rightarrow \frac{p^2}{q^2} = 2 \Rightarrow p^2 = 2q^2, \text{ also ist } p^2 \text{ gerade}$$

$$\Rightarrow p \text{ gerade, also } p = 2m \text{ mit } m \in \mathbb{N}$$

$$\Rightarrow q^2 = 2m^2 \text{ also } q^2 \text{ gerade}$$

$$\Rightarrow q \text{ gerade} \Rightarrow p \text{ und } q \text{ durch } 2 \text{ teilbar; Widerspruch!} \quad \square$$

1.3.3 Vollständige Induktion

Beispiel 1.3.3: Die folgende Formel geht auf C.F. Gauß (1777-1855) als 10-jährigen Schüler zurück:

$$1 + 2 + \dots + n = \frac{n(n+1)}{2}.$$

Gegeben sind Aussagen $A(n)$ für alle natürlichen Zahlen $n \in \mathbb{N}$.

Behauptung: $A(n)$ ist wahr für jedes $n \in \mathbb{N}$.

Beweis:

1. Induktionsanfang: Zeige, dass $A(1)$ wahr ist.
2. Induktionsschritt: Zeige $A(n) \Rightarrow A(n+1)$ für beliebiges $n \in \mathbb{N}$.
Dann gilt $A(n)$ für jedes $n \in \mathbb{N}$.
„Domino-Effekt“: $\underset{1}{|} \curvearrowright \underset{2}{|} \curvearrowright \underset{3}{|} \curvearrowright \underset{4}{|} \curvearrowright \underset{5}{|} \curvearrowright \dots$

Notation: \forall bedeutet „für alle“, \exists heißt „es gibt“.

Abkürzung für Summation von n Zahlen a_1 bis a_n :

$$a_1 + a_2 + \dots + a_n =: \sum_{k=1}^n a_k, \quad \text{etwa} \quad \sum_{k=1}^n k = 1 + 2 + \dots + n,$$

$$\text{z.B.} \quad \sum_{k=1}^3 k = 1 + 2 + 3 = 6 = \frac{3 \cdot 4}{2}$$

Mit diesen Abkürzungen können wir schreiben

Behauptung:

$$\sum_{k=1}^n k = \frac{n(n+1)}{2} \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Beweis.

1. Induktionsanfang:

$$\sum_{k=1}^1 k = 1 = \frac{1(1+1)}{2} \quad \checkmark \quad \text{also ist } A(1) \text{ wahr.}$$

2. Induktionsschritt: Zeige, dass wenn für ein gewisses $n \in \mathbb{N}$

$$\sum_{k=1}^n k = \frac{n(n+1)}{2} \quad \text{gilt,}$$

dann folgt daraus

$$\sum_{k=1}^{n+1} k = \frac{(n+1)(n+2)}{2}.$$

Es gilt:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n+1} k &= \sum_{k=1}^n k + n + 1 = \frac{n(n+1)}{2} + n + 1 \\ &= \frac{n(n+1) + 2(n+1)}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2} \end{aligned}$$

□

Rechenregeln bei Summennotation:

$$c \sum_{k=1}^n a_k = \sum_{k=1}^n c a_k, \quad \sum_{k=1}^n a_k + \sum_{k=1}^n b_k = \sum_{k=1}^n (a_k + b_k),$$

$$\sum_{k=1}^n a_k = \sum_{k=1}^n a_{n+1-k}, \quad \sum_{k=1}^m a_k + \sum_{k=m+1}^n a_k = \sum_{k=1}^n a_k \quad (1 \leq m < n),$$

Bemerkung 1.3.4. Gelegentlich hat man Aussagen $A(n)$ für alle $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq n_0$ mit anderem $n_0 \in \mathbb{N}$ statt $n_0 = 1$. (Wir schreiben $n \geq n_0$ statt $n \in \mathbb{N} \wedge n \geq n_0$)

Beispiel 1.3.5: Für welche $n \in \mathbb{N}$ gilt $2^n > n^2$?

Also $A(n) : 2^n > n^2$; Vermutung: $A(n)$ ist wahr $\forall n \geq n_0$ mit $n_0 = 5$.

Beweis. Wir beweisen das durch vollständige Induktion, allerdings starten wir mit $A(n_0)$ und beachten im Induktionsschritt: $n \geq n_0$!

$$A(5) : 2^5 > 5^2 \quad \checkmark$$

$n \rightarrow n+1$: Es gelte $2^n > n^2$ für ein gewisses $n \geq 5$.

Dann gilt:

$$2^{n+1} = 2 \cdot 2^n > 2 \cdot n^2 = n^2 + n \cdot n > n^2 + 3n > n^2 + 2n + 1 = (n+1)^2 \quad (\text{Binomische Formel})$$

□

1.4 Binominalkoeffizienten und Binominalsatz

Erinnerung *Binomische Formeln*:

$$\begin{aligned} (a+b)^2 &= a^2 + 2ab + b^2 \\ (a-b)^2 &= a^2 - 2ab + b^2 \\ (a+b)(a-b) &= a^2 - b^2 \\ (a+b)^3 &= (a+b)(a+b)^2 = a(a^2 + 2ab + b^2) + b(a^2 + 2ab + b^2) \\ &= a^3 + 2a^2b + ab^2 + a^2b + 2ab^2 + b^3 \\ &= a^3 + 3a^2b + 3ab^2 + b^3 \end{aligned}$$

1.4.1 Fakultät und Binominalkoeffizient

Definition 1.4.1. Die Zahl $n! := 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n$ heißt „n-Fakultät“. Aus formalen Gründen definiert man zusätzlich $0! := 1$.

Mit Hilfe des Produktzeichens schreiben wir

$$\prod_{k=1}^n a_k := a_1 \cdot a_2 \cdot \dots \cdot a_n \quad \text{ist} \quad n! := \prod_{k=1}^n k.$$

Es gilt $(n+1)! = n!(n+1) \quad \forall n \in \mathbb{N}_0$.

Definition 1.4.2. Die Zahl

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

für $n \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq k \leq n$ heißt *Binominalkoeffizient* „n über k“.

Bemerkung 1.4.3. Es gilt

$$\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}, \quad \binom{n}{k} = \frac{(n-k+1)(n-k+2) \cdots (n-1)n}{1 \cdot 2 \cdots (k-1)k}.$$

Beispiele 1.4.4: $\binom{4}{2} = \frac{4!}{2!2!} = \frac{24}{4} = 6, \quad \binom{14}{12} = \frac{13 \cdot 14}{1 \cdot 2} = 91, \quad \binom{10}{0} = 1.$

1.4.2 Binomische Formeln und Pascal'sches Δ

Wie lauten die Koeffizienten nach Ausmultiplikation des Produktes $(a+b)^n$?

$$\begin{array}{rcccccc}
 n=0: & (a+b)^0 & = & 1 & & & \\
 n=1: & (a+b)^1 & = & a+b & & & \\
 n=2: & (a+b)^2 & = & a^2+2ab+b^2 & & & \\
 & \vdots & & & & & \\
 & & & & 1 & 3 & 3 & 1 \\
 & & & & & & & & 1 & 4 & 6 & 4 & 1 \\
 & & & & & \nearrow_{k=0} & \nearrow_{k=1} & \nearrow_{k=2} & & & & & &
 \end{array}$$

Die Einträge im Pascal'schen Δ entstehen als Summe der unmittelbar darüberstehenden Nachbarn. Der k -te Eintrag in Zeile n ist $\binom{n}{k}$.

Vermutung: $(a+b)^n = a^n + \binom{n}{1}a^{n-1}b + \binom{n}{2}a^{n-2}b^2 + \cdots + \binom{n}{n-1}ab^{n-1} + b^n$

Tatsächlich gilt:

Satz 1.4.5 (Binomialsatz). Für $a, b \in \mathbb{R}$ und $n \in \mathbb{N}_0$ gilt

$$(a+b)^n = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} a^{n-k} b^k.$$

Der Beweis kann durch vollständige Induktion erbracht werden.

1.5 Ungleichungen und Beträge

Die reellen Zahlen \mathbb{R} besitzen folgende *Anordnungseigenschaften*:

1. $\forall a, b \in \mathbb{R}$ gilt genau eine der Beziehungen: $a < b$ oder $a = b$ oder $b < a$.

Für $a, b, c \in \mathbb{R}$ gilt

2. $a < b \wedge b < c \Rightarrow a < c$ (Transitivität)

3. $a < b \Rightarrow a + c < b + c$ (Monotonie der Addition)

4. $a < b \Rightarrow ac < bc$ für $c > 0$ (Monotonie der Multiplikation)
 $\Rightarrow ac > bc$ für $c < 0$

Bemerkungen 1.5.1:

- (i) $a < b$ heißt Ungleichung („ a kleiner als b “); gleichbedeutend mit $b > a$ („ b größer als a “)
- (ii) $a \leq b$ bedeutet $a < b$ oder $a = b$

Einige Folgerungen aus den Anordnungseigenschaften:

$$a < 0 \Leftrightarrow -a > 0. \quad (1.1)$$

Beweis. Verwende Eigenschaft 4 mit $c := -1$. □

$$0 < a < b \Rightarrow a^n < b^n \quad \forall n \in \mathbb{N}; \quad (1.2)$$

Beweis. Durch vollständige Induktion:

Sei $0 < a < b$ und $a^n < b^n$; dann gilt

$$a^{n+1} = a^n \cdot a < b^n a \text{ und } ab^n < b \cdot b^n = b^{n+1}, \quad \text{also auch } a^{n+1} < b^{n+1}. \quad \square$$

Definition 1.5.2. Sei $a \in \mathbb{R}$ mit $a \geq 0$. Unter $\sqrt[n]{a}$ („ n -te Wurzel aus a “) versteht man diejenige nichtnegative reelle Zahl x , für die $x^n = a$ gilt.

Dann gilt auch

$$0 \leq a < b \Rightarrow \sqrt[n]{a} < \sqrt[n]{b} \quad (1.3)$$

Beweis. indirekt mit (1.2). □

Bernoulli'sche Ungleichung: Für $n \in \mathbb{N}$ und $x \in \mathbb{R}$ mit $x > -1$ gilt

$$(1+x)^n \geq 1+nx. \quad (1.4)$$

Beweis. Durch vollständige Induktion:

$n = 1$ ist klar; zu zeigen bleibt $n \rightarrow n+1$

$$\begin{aligned} (1+x)^{n+1} &= (1+x)(1+x)^n \geq (1+x)(1+nx) \\ &= 1 + (n+1)x + nx^2 \geq 1 + (n+1)x, \text{ denn } x^2 \geq 0 \quad \forall x. \end{aligned} \quad \square$$

Bemerkungen 1.5.3:

(i) Gleichheit nur für $x = 0$ oder $n = 1$.

(ii) Auch richtig für $x \geq -2$.

Verwendung in vielen Beweisen! Auch um komplizierte Terme mit Potenzen nach unten abzuschätzen; einfaches Beispiel:

$$\begin{aligned} 2 \cdot 2^{10} &= (2 + 0.2)^{10} = [2(1 + 0.1)]^{10} = 2^{10}(1 + 0.1)^{10} \\ &\geq 2^{10}(1 + 10 \cdot 0.1) = 2^{10} \cdot 2 \\ &= 2048 \quad (2 \cdot 2^{10} \approx 2656) \end{aligned}$$

Beispiel 1.5.4 (zu Ungleichungen): Für welche $x \in \mathbb{R}$ gilt $\frac{2x+1}{x-1} < 1$? Gesucht:

$$L = \{x \in \mathbb{R} : \frac{2x+1}{x-1} < 1\}.$$

L heißt Lösungsmenge; dabei ist die zugrunde liegende Zahlenmenge (hier: \mathbb{R}) wichtig!

Eine Rechnung mit Fallunterscheidung liefert

$$L = \{x \in \mathbb{R} : -2 < x < 1\}.$$

Dies ist ein sogenanntes Intervall.

Definition 1.5.5. Die folgenden Teilmengen von \mathbb{R} werden *Intervalle* genannt; dabei seien $a, b \in \mathbb{R}$ mit $a < b$.

- (i) $[a, b] := \{x \in \mathbb{R} : a \leq x \leq b\}$ abgeschlossenes Intervall
- (ii) $(a, b) := \{x \in \mathbb{R} : a < x < b\}$ offenes Intervall auch $]a, b[$
- (iii) $[a, b) := \{x \in \mathbb{R} : a \leq x < b\}$ (rechts) halboffenes Intervall
 $(a, b] := \{x \in \mathbb{R} : a < x \leq b\}$ (links) halboffenes Intervall
- (iv) $[a, \infty) := \{x \in \mathbb{R} : x \geq a\}$ und $(a, \infty) := \{x \in \mathbb{R} : x > a\}$
 $(-\infty, b] := \{x \in \mathbb{R} : x \leq b\}$, $(-\infty, b) := \{x \in \mathbb{R} : x < b\}$

Sprechweisen: a heißt linker Randpunkt, b rechter Randpunkt, $(b - a)$ Intervall-Länge.

Betrag und Signum: Welchen Abstand hat -3 zum Nullpunkt? $+3$

Allgemein: Abstand von $x \in \mathbb{R}$ zum Nullpunkt?

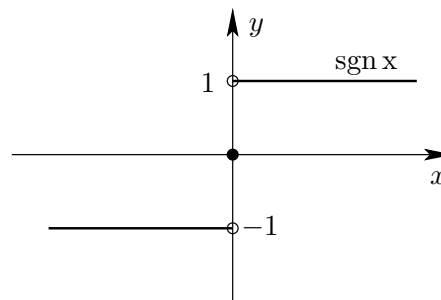
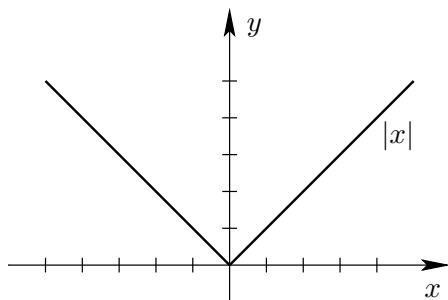
Definition 1.5.6. Sei $x \in \mathbb{R}$. Dann bedeutet

$$|x| := \begin{cases} x & \text{für } x \geq 0 \\ -x & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (\text{Absolut-}) \text{ Betrag von } x \text{ und}$$

$$\operatorname{sgn} x := \begin{cases} 1 & \text{für } x > 0 \\ 0 & \text{für } x = 0 \\ -1 & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad \text{Signum oder Vorzeichen von } x$$

Bemerkungen 1.5.7:

- (i) Die Funktionen $|x|$ und $\operatorname{sgn} x$ haben folgenden Verlauf:



- (ii) Für $x \in \mathbb{R}$ ist $|x|$ der Abstand von x zum Nullpunkt. Entsprechend ist $|x - y|$ der Abstand von x zu $y \in \mathbb{R}$.
- (iii) Es gilt $x = |x| \operatorname{sgn} x$ und $|x| = x \operatorname{sgn} x$ für $x \in \mathbb{R}$.
- (iv) Die wesentlichen Eigenschaften von $|\cdot|$ sind
 - (a) $|x| = 0 \Leftrightarrow x = 0$ für $x \in \mathbb{R}$
 - (b) $|\lambda x| = |\lambda| \cdot |x|$ für $\lambda, x \in \mathbb{R}$
 - (c) $|x + y| \leq |x| + |y|$ für $x, y \in \mathbb{R}$ (Dreiecksungleichung).

Diese Eigenschaften sind auch für den (euklidischen) Abstand im \mathbb{R}^2 erfüllt (allgemeiner auch im \mathbb{R}^n , $n \geq 2$)!

(v) Weitere Eigenschaften von $|\cdot|$ sind

(d) $|x| \geq 0 \quad \forall x \in \mathbb{R}$

(e) $|-x| = |x| \quad \forall x \in \mathbb{R}$

(f) $-|x| \leq x \leq |x| \quad \forall x \in \mathbb{R}$

(vi) Aufgrund der stückweisen Definition von $|x|$ können (Un-)Gleichungen in denen $|x|$ vorkommt, am besten durch Fallunterscheidung aufgelöst werden!

Beispiele 1.5.8:

(a) $|x - 3| \leq 1$?

Anschaulich: Abstand von x zu 3 ist kleiner oder gleich 1, also $L = [2, 4]$.

1. Fall: $x - 3 \geq 0 \quad (\Leftrightarrow x \geq 3)$.

Dann $|x - 3| \leq 1 \Leftrightarrow x - 3 \leq 1 \Leftrightarrow x \leq 4$. Dies liefert $[3, 4]$ als Lösungen.

2. Fall: $x - 3 < 0 \Leftrightarrow x < 3$.

Dann $|x - 3| \leq 1 \Leftrightarrow -(x - 3) \leq 1 \Leftrightarrow x - 3 \geq -1 \Leftrightarrow x \geq 2$. Dies liefert $[2, 3)$ als Lösungen.

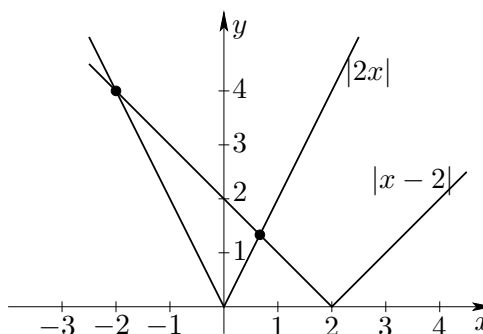
Fazit: $L = [3, 4] \cup [2, 3) = [2, 4]$

(b) $|x - 2| = |2x|$.

1. Fall: $x \geq 2$: $|x - 2| = |2x| \Leftrightarrow x - 2 = 2x \Leftrightarrow -2 = x$; keine Lösung.

2. Fall: $0 \leq x < 2$: $|x - 2| = |2x| \Leftrightarrow 2 - x = 2x \Leftrightarrow x = \frac{2}{3}$; dies ist eine Lösung.

3. Fall: $x < 0$: $2 - x = -2x \Leftrightarrow 2 = -x \Leftrightarrow x = -2$; ist ebenfalls eine Lösung.



(c) In der Ebene $\mathbb{R}^2 = \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ („ xy -Ebene“):

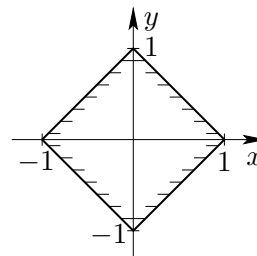
$$L = \{(x, y) : |x| + |y| \leq 1\}$$

$x \geq 0, y \geq 0$: 1. Quadrant $\Rightarrow y \leq 1 - x$

$x < 0, y \geq 0$: 2. Quadrant $\Rightarrow y \leq 1 + x$

$x < 0, y < 0$: 3. Quadrant $\Rightarrow y \geq -x - 1$

$x \geq 0, y < 0$: 4. Quadrant $\Rightarrow y \geq x - 1$



(vii) Es gilt $x^2 \leq y^2 \Leftrightarrow |x| \leq |y|$ für $x, y \in \mathbb{R}$!

Denn: $\sqrt{\cdot}$ ist monoton und $\sqrt{x^2} = |x| \quad \forall x \in \mathbb{R}$! ($\sqrt{|-2|^2} = 2 \neq -2$!)

Beispiele 1.5.9:

(i)

$$|x-2| \leq |x| \Leftrightarrow (x-2)^2 \leq x^2 \Leftrightarrow x^2 - 4x + 4 \leq x^2 \Leftrightarrow 4 \leq 4x \Leftrightarrow x \geq 1$$

(ii)

$$\begin{aligned} x^2 + 4x \geq 1 &\Leftrightarrow x^2 + 4x + 4 \geq 5 \Leftrightarrow (x+2)^2 \geq 5 \Leftrightarrow |x+2| \geq \sqrt{5} \\ &\Leftrightarrow x \geq \sqrt{5} - 2 \text{ oder } x \leq -2 - \sqrt{5}, \quad \text{also } L = (-\infty, -2 - \sqrt{5}] \cup [\sqrt{5} - 2, \infty) \end{aligned}$$

Kapitel 2

Elementare Rechentechniken

2.1 Potenzen

2.1.1 Exponentielle Schreibweise, normalisierte Gleitpunktdarstellung

Beispiel 2.1.1: Wieviele Sauerstoffatome sind in 10 m^3 Luft bei Normalbedingungen (also 0°C , 10130 Pa) enthalten?

Daten:

- Luft enthält 20.8 Volumenprozent Sauerstoff
- 1 mol Gasteilchen beanspruchen bei Normalbedingungen ein Volumen von 22.4 L (Molvolumen; A. AVOGADRO (1776-1856))
- 1 mol eines chemischen Stoffes enthält
 $L := 602\,300\,000\,000\,000\,000\,000$ Teilchen (Loschmidt'sche Zahl)

Probleme:

- Unterschiedliche Einheiten für gleiche Größen verwendet:
 m^3 und L; $1 \text{ m}^3 = 1\,000 \text{ L}$ bzw. $1 \text{ L} = 0.001 \text{ m}^3 (= (0.1 \text{ m})^3)$
verwende entweder „10 000 L Luftmenge“ oder „1 mol = 0.0224 m^3 “!
- Rechnen mit derart großen bzw. kleinen Zahlen ist sehr unhandlich! Verwende deshalb die sogenannte exponentielle Schreibweise: Jede reelle Zahl $x \neq 0$ kann als Produkt aus einem *Vorzeichen*, einer Zahl zwischen 1 und 10 (der *Mantisse*) und einer Zehnerpotenz mit ganzzahligem *Exponenten* geschrieben werden:

$$x = \pm c \cdot 10^n, \text{ mit } c \in [1, 10) \text{ und } n \in \mathbb{Z}. \quad (2.1)$$

Bemerkungen 2.1.2:

- (i) Für die Zahldarstellung auf Rechnern wird die in Def. 2.1.3 (s.u.) festgelegte normalisierte Gleitpunktdarstellung gewählt, dazu wird die Mantisse aus dem Intervall $[0.1, 1)$ gewählt.
- (ii) Die Zahl n gibt die Anzahl der Stellen an, um die der Dezimalpunkt verschoben werden muss, um aus c die Zahl x zu erhalten. Bei positivem n ist der Punkt nach rechts, bei negativem nach links zu schieben: $1 \cdot 10^{-3} = 0.001$.

Definition 2.1.3. *Normalisierte Gleitpunktdarstellung* einer reellen Zahl $x \neq 0$:

$$x = v \cdot a \cdot E^b \quad (2.2)$$

mit dem *Vorzeichen* v ($= \pm 1$), der *Basis* $E \in \mathbb{N}, E > 1$, meistens $E = 2$, dem ganzzahligen *Exponenten* $b \in \mathbb{Z}$ und der *Mantisse*

$$a = a_1 E^{-1} + a_2 E^{-2} + \dots + a_k E^{-k}. \quad (2.3)$$

Dabei ist k die Mantissenlänge und die a_i sind Ziffern des Zahlensystems, also 0 oder 1 im Dualsystem mit der Basis 2, allgemein $0 \leq a_i \leq E - 1$. Den Punkt (oder das Komma) muss man sich also vor der ersten Ziffer vorstellen. Ist die Zahl ungleich 0, so soll auch die erste Ziffer ungleich 0 sein, d.h.

$$\text{entweder } E^{-1} \leq a < 1 \quad \text{oder} \quad a = 0. \quad (2.4)$$

x heißt dann *k-stellige normalisierte Gleitpunktzahl zur Basis E*. Das Rechnen mit solchen Zahlen heißt *Rechnung mit k wesentlichen Stellen*.

Beispiele 2.1.4:

$1 \text{ m}^3 = 0.1 \cdot 10^4 \text{ l}$, $1 \text{ l} = 0.1 \cdot 10^{-2} \text{ m}^3$, $L = 0.6023 \cdot 10^{24}$, Normalbedingungen: 0°C , $0.1013 \cdot 10^6 \text{ Pa}$.

2.1.2 Multiplikation und Division

Beim Rechnen mit Zahlen in exponentieller Darstellung sind die Rechenregeln für Potenzen zu verwenden.

Zur Erinnerung:

$$a^n \cdot a^m = a^{n+m} \quad \text{bei gleicher Basis (Grundzahl)!}$$

$$a^n \cdot b^n = (ab)^n \quad \text{bei gleichem Exponent (Hochzahl)!}$$

$$\frac{a^n}{a^m} = a^{n-m}, \quad \frac{a^n}{b^n} = \left(\frac{a}{b}\right)^n.$$

Daraus folgt für Zahlen $x = c_1 \cdot 10^n$ und $y = c_2 \cdot 10^m$ in exponentieller Darstellung:

$$xy = c_1 \cdot c_2 \cdot 10^{n+m}, \quad \frac{x}{y} = \frac{c_1}{c_2} \cdot 10^{n-m}.$$

Beachte: Das Ergebnis ist nicht automatisch in exponentieller Standardform!

Beispiel 2.1.5: $x = 7.2 \cdot 10^4$, $y = 2.1 \cdot 10^{-2}$

$$\Rightarrow x \cdot y = 7.2 \cdot 2.1 \cdot 10^2 = 15.12 \cdot 10^2 = \underline{1.512 \cdot 10^3}.$$

Mit diesen Regeln ergibt sich für das Beispiel 2.1.1:

10 m^3 Luft enthalten $\frac{20.8}{100} \cdot 10^4 \text{ L} = 20.8 \cdot 10^2 \text{ L} = 2.08 \cdot 10^3 \text{ L}$ Sauerstoff.

$2.08 \cdot 10^3 \text{ L}$ Gas entsprechen

$$\frac{2.08 \cdot 10^3 \text{ mol}}{2.24 \cdot 10^1} = \frac{2.08}{2.24} 10^2 \text{ mol} \approx 0.93 \cdot 10^2 \text{ mol} = 9.3 \cdot 10^1 \text{ mol}.$$

$9.3 \cdot 10^1 \text{ mol}$ Gas enthalten

$$9.3 \cdot 10^1 \cdot 6.023 \cdot 10^{23} = 9.3 \cdot 6.023 \cdot 10^{24} = 56.0139 \cdot 10^{24} \approx 5.6 \cdot 10^{25} \text{ Teilchen}.$$

10 m^3 Luft enthalten $5.6 \cdot 10^{25}$ Sauerstoffmoleküle (O_2), also

$$2 \cdot 5.6 \cdot 10^{25} = 11.2 \cdot 10^{25} = 1.12 \cdot 10^{26} \text{ Sauerstoffatome}.$$

2.1.3 Potenzieren und Wurzelziehen

Erinnerung: $(a^m)^n = a^{m \cdot n}$

Damit folgt

$$(x \cdot 10^m)^n = x^n \cdot (10^m)^n = x^n \cdot 10^{m \cdot n}$$

Das Ergebnis muss nicht exponentielle Standardform haben!

Beispiel 2.1.6: $(4.2 \cdot 10^3)^2 = 4.2^2 \cdot 10^6 = 17.64 \cdot 10^6 = 1.764 \cdot 10^7$.

Die gleiche Regel gilt im Prinzip auch für das Wurzelziehen:

$$\sqrt{4 \cdot 10^6} = (4 \cdot 10^6)^{1/2} = 4^{1/2} \cdot (10^6)^{1/2} = 2 \cdot 10^{6 \cdot \frac{1}{2}} = 2 \cdot 10^3$$

Hier kann aber eine Zehnerpotenz mit gebrochenem Exponenten entstehen!

Beispiel 2.1.7: $\sqrt{4.2 \cdot 10^5} = \sqrt{4.2} \cdot 10^{5/2}$.

Um zur exponentiellen Darstellung des Ergebnisses zu gelangen, muß der ganzzahlige Anteil des Exponenten abgespalten werden:

$$\sqrt{4.2 \cdot 10^5} = \sqrt{4.2} \cdot 10^{2+1/2} = \sqrt{4.2} \cdot \sqrt{10} \cdot 10^2 = \sqrt{42} \cdot 10^2 \approx 6.5 \cdot 10^2$$

2.1.4 Addition und Subtraktion

Es ist klar, wie zwei Zahlen in exponentieller Darstellung addiert (bzw. subtrahiert) werden, falls die Zehnerpotenzen gleiche Exponenten besitzen:

$$c_1 \cdot 10^n + c_2 \cdot 10^n = (c_1 + c_2) \cdot 10^n,$$

etwa

$$7.4 \cdot 10^{-3} + 4.2 \cdot 10^{-3} = 11.6 \cdot 10^{-3} = 1.16 \cdot 10^{-2}.$$

Sind die Exponenten verschieden, so müssen die Zahlen erst umgeformt werden:

$$c_1 \cdot 10^n + c_2 \cdot 10^m = c_1 \cdot 10^n + (c_2 \cdot 10^{m-n}) \cdot 10^n = (c_1 + c_2 \cdot 10^{m-n}) \cdot 10^n$$

Das Ergebnis muss nicht die exponentielle Standardform haben!

Beispiele 2.1.8:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad 6.04 \cdot 10^4 + 3.6 \cdot 10^3 &= 60.4 \cdot 10^3 + 3.6 \cdot 10^3 = 64 \cdot 10^3 = 6.4 \cdot 10^4, \text{ oder} \\ &= 6.04 \cdot 10^4 + 0.36 \cdot 10^4 = 6.4 \cdot 10^4 \end{aligned}$$

$$\text{(b)} \quad 6.04 \cdot 10^3 + 3.6 \cdot 10^5 = 6.04 \cdot 10^3 + 360 \cdot 10^3 = 366.04 \cdot 10^3 = 3.6604 \cdot 10^5$$

$$\text{(c)} \quad 9.82 \cdot 10^{-4} - 7.1 \cdot 10^{-5} = 9.82 \cdot 10^{-4} - 0.71 \cdot 10^{-4} = 9.11 \cdot 10^{-4}$$

2.2 Logarithmen

2.2.1 Definition und erste Eigenschaften

Wir haben bisher folgende Zehnerpotenzen kennengelernt:

$$10^0 = 1, \quad 10^1 = 10, \quad 10^2 = 100, \quad \dots$$

$$10^n = 10 \cdot 10 \cdot \dots \cdot 10 \quad \text{für } n \in \mathbb{N}$$

$$10^{-n} = 0.1 \cdot 0.1 \cdot \dots \cdot 0.1 = \frac{1}{10} \cdot \dots \cdot \frac{1}{10} = \frac{1}{10^n} \quad \text{für } n \in \mathbb{N}$$

$$10^{m/n} = (\sqrt[n]{10})^m = \sqrt[n]{10^m} \quad \text{für } m \in \mathbb{Z}, n \in \mathbb{N}$$

Man kann 10^x auch für beliebige reelle Zahlen $x \in \mathbb{R}$ definieren (als Grenzwert von 10^{r_k} mit einer Folge von Brüchen $r_k \rightarrow x$; der Begriff „Grenzwert“ wird später erklärt).

Definition 2.2.1. Es sei $a \in \mathbb{R}$ mit $a > 0$ und es gelte $a = 10^b$ für ein $b \in \mathbb{R}$. Dann wird b der (dekadische) Logarithmus von a genannt und mit $\log a$ bezeichnet.

Bemerkungen 2.2.2:

- (i) Gelegentlich wird auch $\lg a$, oder (genauer) $\log_{10} a$ geschrieben.
- (ii) Der Logarithmus von a , also $\log a$, ist diejenige reelle Zahl, für die $a = 10^{\log a}$ gilt.
- (iii) Der dekadische Logarithmus ist ein wichtiger Begriff in der Chemie im Zusammenhang mit dem pH-Wert einer wässrigen Lösung (Säure oder Lauge).
 pH-Wert := negativer dekadischer Logarithmus der Protonenkonzentration

$$= -\log \frac{c_{\text{H}^+}}{\text{mol/L}}.$$

Beispiel 2.2.3:

$$\log 0.001 = -3, \text{ denn } 10^{-3} = 0.001$$

$$\vdots \qquad \qquad \qquad \vdots$$

$$\log 10 = 1, \text{ denn } 10^1 = 10.$$

Welchen Wert hat dann $\log 2$?

Nach Definition: $\log 2$ ist die Zahl $b \in \mathbb{R}$, für die $10^b = 2$ gilt.

Wie groß ist b näherungsweise?

Es ist $10^0 = 1$, $10^1 = 10$ und $1 < 2 < 10$, d.h. es gilt

$$10^0 < 10^{\log 2} < 10^1.$$

Aus der Monotonie der Potenzfunktion $x \rightarrow 10^x$ (später!) folgt

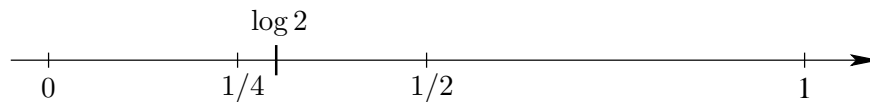
$$0 < \log 2 < 1.$$

Es ist $\sqrt{10} = 10^{1/2} = 3.16\dots$ und $10^{1/4} = 10^{1/2 \cdot 1/2} = \sqrt{\sqrt{10}} = \sqrt{3.16\dots} = 1.778\dots$

Damit gilt genauer:

$$10^{1/4} < 10^{\log 2} < 10^{1/2}, \text{ also } \underline{0.25 < \log 2 < 0.5}.$$

Schachtelt man $\log 2$ auf diese Weise immer weiter ein, so erhält man $\log 2 = 0.301029\dots$



Was ist dann $\log 20$, oder $\log(2 \cdot 10^n)$?

Erinnerung: Aus den Potenzgesetzen ergeben sich die Regeln

$$\log(ab) = \log a + \log b$$

$$\log a^n = n \log a$$

$$\log \frac{a}{b} = \log a - \log b$$

$$\log a^x = x \log a$$

Damit folgt:

$$\log 20 = \log(2 \cdot 10) = \log 2 + \log 10 = \log 2 + 1 = 1.301029 \dots$$

und

$$\log(2 \cdot 10^n) = \log 2 + n.$$

Allgemein gilt:

$$\log(c \cdot 10^n) = \log c + n.$$

2.2.2 Graphische Darstellung des Logarithmus

Zunächst einige Fakten:

- (i) $\log a$ existiert nur für $a > 0$, denn $10^x > 0$ für jedes $x \in \mathbb{R}$.
- (ii) $\log 1 = 0$, denn $10^0 = 1$
- (iii) $\log x$ ist *streng monoton wachsend*, d.h. $0 < a < b \Rightarrow \log a < \log b$.
Dies folgt aus der entsprechenden Monotonie von $x \rightarrow 10^x$:

$$0 < a < b \Rightarrow 10^{\log a} < 10^{\log b}, \text{ also } \log a < \log b, \text{ sonst Widerspruch.}$$

- (iv) Für $a \in (1, 10)$ gilt $\log a \in (0, 1)$.

- (v) Für $a \in (0, 1)$ gilt $\log a < 0$, denn

$$\log a = -\log a^{-1} = -\log \frac{1}{a} \text{ und } \frac{1}{a} > 1 \Rightarrow \log \frac{1}{a} > 0 \Rightarrow -\log \frac{1}{a} < 0.$$

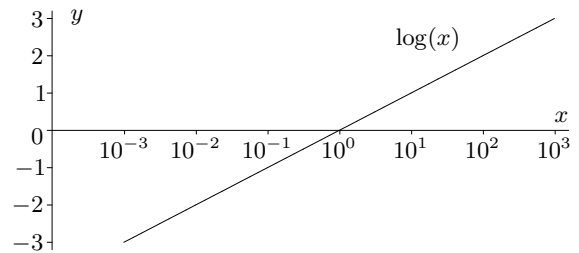
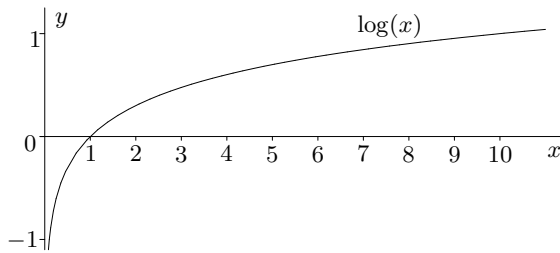
- (vi) $\log a$ nimmt beliebig große Werte für große a an:

$$a = 10^n \text{ mit } n \in \mathbb{N} \Rightarrow \log a = n.$$

Also: $\log a$ ist nach oben unbeschränkt.

- (vii) $\log a$ nach unten unbeschränkt: $a = \frac{1}{10^n} = 10^{-n} \Rightarrow \log a = -n$.

Der Graph von $\log x$ hat (rechts in halblogarithmischer Darstellung) folgenden Verlauf:



2.2.3 Natürlicher Logarithmus

Wir haben oben $\log a$ als diejenige Zahl definiert, für die $10^{\log a} = a$ gilt. Anders ausgedrückt: Bei vorgegebenem $a > 0$ ist $x = \log a$ die Lösung der Gleichung $10^x = a$, d.h. der (dekadische) Logarithmus ist die Umkehrfunktion (genauer Begriff später) der Potenzfunktion $x \rightarrow 10^x$.

Bei vielen (Wachstums-) Prozessen in der Natur spielt eine andere Potenzfunktion eine herausragende Rolle, nämlich die sogenannte Exponentialfunktion e^x . Dabei wird als Basis die sogenannte Euler'sche Zahl $e = 2.71828\dots$ verwendet. Die genaue Definition der (irrationalen) Zahl e kann erst später gegeben werden. Zur Motivation:

Beispiel 2.2.4: Eine Population (Bevölkerung; auch von Tieren, Pflanzen, Bakterien etc.) bestehe zur Zeit $t = 0$ aus N_0 Individuen. Die Anzahl zur Zeit $t > 0$ sei $N(t)$. Angenommen die Wachstumsrate ($\frac{dN}{dt} \approx \frac{\Delta N}{\Delta t}$) sei proportional zur Bevölkerungszahl, also $\frac{dN(t)}{dt} = kN(t)$ mit einer Wachstumskonstante $k > 0$.

Wie lässt sich $N(t)$ zur Zeit $t > 0$ aus N_0 berechnen? Da wir die sogenannte Differentialgleichung $\frac{dN(t)}{dt} = kN(t)$ für $t > 0$, $N(0) = N_0$ mit unserem jetzigen Wissen nicht lösen können, versuchen wir folgende Näherung. Wir wählen ein großes $n \in \mathbb{N}$ und setzen $\Delta t := t/n$. Dann gilt näherungsweise

$$\frac{N(\Delta t) - N(0)}{\Delta t} = \frac{\Delta N}{\Delta t} \approx kN(0),$$

also

$$N(\Delta t) = N(0) + kN(0)\Delta t \approx N_0(1 + k\Delta t).$$

Entsprechend gilt

$$\frac{N(2\Delta t) - N(\Delta t)}{\Delta t} \approx kN(\Delta t),$$

$$\text{also } N(2\Delta t) \approx N(\Delta t)(1 + k\Delta t) \approx N_0(1 + k\Delta t)^2.$$

Nach insgesamt n Schritten erhält man so

$$N(n\Delta t) \approx N_0(1 + k\Delta t)^n, \text{ also } N(t) \approx N_0 \left(1 + \frac{kt}{n}\right)^n.$$

Für den speziellen Zeitpunkt $t = 1/k$ ergibt sich

$$N(1/k) \approx N_0(1 + 1/n)^n,$$

wobei wir mit wachsendem n eine bessere Näherung erwarten. Es gilt:

n	1	2	3	...	10	...	100	...	„ ∞ “
$(1 + \frac{1}{n})^n$	2	2.25	2.37	...	2.594	...	2.705	...	e

D.h. $(1 + \frac{1}{n})^n$ strebt gegen die sogenannte Euler'sche Zahl $e = 2.71828\dots$, wenn n immer größer wird.

Also gilt: $N(1/k) = N_0 \cdot e$,

und allgemein $N(t) = N_0 \cdot e^{kt}$ für $t \geq 0$.

Bemerkung 2.2.5. Wie $(1 + \frac{1}{n})^n$ strebt auch $(1 + \frac{kt}{n})^{\frac{n}{kt}}$ gegen e und damit gilt

$$\left(1 + \frac{kt}{n}\right)^n = \left[\left(1 + \frac{kt}{n}\right)^{\frac{n}{kt}}\right]^{kt} \rightarrow e^{kt}$$

Die Umkehrfunktion zur Exponentialfunktion e^x wird natürlicher Logarithmus genannt und mit $\ln x$ bezeichnet (Logarithmus naturalis). Genauer:

Definition 2.2.6. Sei $a > 0$. Der natürliche Logarithmus von a , kurz $\ln a$, ist diejenige reelle Zahl, für die $e^{\ln a} = a$ gilt. Dabei ist $e = 2.71828\dots$ die Euler'sche Zahl.

Insbesondere gilt $e^{\ln 10} = 10$ und damit auch

$$e^{x \ln 10} = (e^{\ln 10})^x = 10^x$$

Daraus folgt nach Definition 2.2.1 und Definition 2.2.6:

$$\begin{aligned} 10^x &= a \Rightarrow x = \log a \\ e^{x \ln 10} &= a \Rightarrow x \ln 10 = \ln a \end{aligned}$$

Also gilt folgende *Umrechnungsformel* zwischen $\ln a$ und $\log a$:

$\ln a = \ln 10 \cdot \log a$

mit $\ln 10 \approx 2.303$

Beispiel 2.2.7: $\ln(9.831 \cdot 10^{-2}) = ?$

Es ist

$$\log(9.831 \cdot 10^{-2}) = \log 9.831 - 2 = 0.9926 - 2 = -1.0074.$$

Damit folgt

$$\ln(9.831 \cdot 10^{-2}) = 2.303 \cdot (-1.0074) = -2.320.$$

2.3 Algebraische Gleichungen

Unter einer algebraischen Gleichung versteht man eine Gleichung in einer oder mehreren Unbekannten (etwa x, y, z, \dots), bei der jede Variable stets als Potenz mit natürlichem Exponenten auftritt.

Beispiele 2.3.1:

(a) $x^3 + 2x^2 - 4x = 7 + 2x$

(b) $x^2 + 2xy = y^2$

Viele Anwendungen führen auf mehrere Gleichungen mit mehreren Variablen, d.h. auf ein sogenanntes Gleichungssystem etwa (a) und (b) zusammen.

Wie löst man solche Gleichungssysteme?

2.3.1 Eine Gleichung mit einer Variablen

Eine algebraische Gleichung in einer Variablen lässt sich immer auf die Form

$$P(x) = 0$$

mit einem sogenannten *Polynom*

$$P(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0 = \sum_{k=0}^n a_k x^k, \quad a_n \neq 0$$

bringen. Da die Gleichung $P(x) = 0$ durch a_n dividiert werden kann, reicht es aus Polynome mit führendem Koeffizienten $a_n = 1$ zu betrachten. Der höchste Exponent n heißt Grad des Polynoms.

Beispiel 2.3.2: $P(x) = x^3 + 2x^2 - 6x - 7$ Polynom 3. Grades (kubisches Polynom).

Bemerkung 2.3.3. Eine gegebene Gleichung in einer Variable lässt sich evtl. erst durch Umformen in diese Form bringen.

Beispiele 2.3.4:

$$(a) \quad \frac{5}{2x-7} = \frac{4}{x+2} \quad \Leftrightarrow \quad \cdots \quad \Leftrightarrow \quad x-8=0,$$

$$(b) \quad \frac{2x}{x-1} = x+1 \quad \Leftrightarrow \quad \cdots \quad \Leftrightarrow \quad x^2 - 2x - 1 = 0. \quad (\text{quadratische Gleichung})$$

Die Lösungen von $P(x) = 0$ sind die sogenannten Nullstellen des Polynoms P . Das Beispiel $P(x) = x^2 + 1$ zeigt, daß ein Polynom *keine reellen Nullstellen* haben muß. Dieser Defekt läßt sich beheben, indem man sogenannte komplexe Zahlen $z = x + iy$ mit $i^2 = -1$ einführt; genaueres dazu später.

Die Berechenbarkeit der Lösungen von $P(x) = 0$ hängt vom Grad des Polynoms ab.

Der Fall Polynomgrad $n = 1$.

Dann ist $P(x) = a_1 x + a_0$ mit $a_1 \neq 0$, also $P(x) = 0 \Leftrightarrow x = -\frac{a_0}{a_1}$.

Beispiel 2.3.5 (aus der Chemie): Eine 0.1 molare Lösung habe die Dichte 1.004 g/cm^3 . Der gelöste Stoff hat eine molare Masse von 184 g/mol . Welche Molalität hat die Lösung?

Zur Erinnerung:

- Molarität = molare Konzentration einer Lösung ist definiert als $c = \frac{n}{V}$ mit n = Stoffmenge in mol, V = Volumen der Lösung in Liter. Diese ist temperaturabhängig!
- Molalität definiert als $\mu = \frac{n}{m_L}$ mit m_L = Masse des Lösungsmittels in kg. Diese ist nicht temperaturabhängig!

Welcher Zusammenhang besteht zwischen c und μ ?

$$c = \frac{n}{V} = \frac{\mu m_L}{V} = \mu \frac{m_L}{m_G + m_L} \frac{m_G + m_L}{V},$$

mit m_G = Masse des gelösten Stoffes in kg.

Sei ρ die Dichte der Lösung in $\text{g/cm}^3 = \text{kg/L}$. Dann ist $\rho = \frac{m_G + m_L}{V}$, also

$$c = \mu \rho \frac{m_L}{m_G + m_L} = \mu \rho \frac{1}{1 + \frac{m_G}{m_L}}.$$

Sei M_G das molare Gewicht (Masse/Stoffmenge) des gelösten Stoffes in g/mol. Dann gilt

$$1000 \cdot m_G = n M_G = \text{Masse des gelösten Stoffes in g, also } m_G = \frac{n M_G}{1000}.$$

Damit folgt

$$\frac{m_G}{m_L} = \frac{n M_G}{1000 \frac{n}{\mu}}, \text{ also } c = \frac{\mu \rho}{1 + \frac{n M_G}{1000} \frac{1}{n/\mu}}$$

$$\Rightarrow \boxed{c = \frac{\mu \rho}{1 + \frac{\mu M_G}{1000}}}$$

Im Beispiel gegeben: $c = 0.1 \text{ mol/L}$, $\rho = 1.004 \text{ kg/L}$, $M_G = 184 \text{ g/mol}$.

Gesucht ist μ . Also ist zunächst $c = \frac{\mu \rho}{1 + \frac{\mu M_G}{1000}}$ nach μ aufzulösen:

$$\begin{aligned} c = \frac{\mu \rho}{1 + \frac{\mu M_G}{1000}} &\Leftrightarrow c + \frac{c \mu M_G}{1000} = \mu \rho \Leftrightarrow c = \mu \rho - \mu \frac{c M_G}{1000} \\ &\Leftrightarrow \mu = \frac{c}{\rho - \frac{c M_G}{1000}} \end{aligned}$$

Zahlenwert:

$$\begin{aligned} \mu &= \frac{0.1}{1.004 - \frac{0.1 \cdot 184}{1000}} \frac{\text{mol}}{\text{kg}} = \frac{0.1}{1.004 - \frac{18.4}{1000}} \\ &= \frac{0.1}{1.004 - 0.0184} \frac{\text{mol}}{\text{kg}} = \frac{0.1}{0.0856} \approx 0.101 \frac{\text{mol}}{\text{kg}}. \end{aligned}$$

Beachte: Der Faktor zwischen den Einheiten ist schon verrechnet!

Der Fall Polynomgrad $n = 2$.

Nach Normierung gilt

$$P(x) = x^2 + px + q$$

Lösung der Gleichung $P(x) = 0$ durch quadratische Ergänzung

$$\begin{aligned} x^2 + 2x \frac{p}{2} + q &= 0, \Leftrightarrow \left(x + \frac{p}{2}\right)^2 - \left(\frac{p}{2}\right)^2 + q = 0 \\ &\Leftrightarrow \left(x + \frac{p}{2}\right)^2 = \frac{p^2}{4} - q. \end{aligned}$$

$D := \frac{p^2}{4} - q$ heißt *Diskriminante*, da das Vorzeichen von D über die reelle Lösbarkeit entscheidet.

Für $D \geq 0$ gilt:

$$\left|x + \frac{p}{2}\right| = \sqrt{\frac{p^2}{4} - q},$$

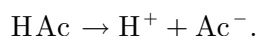
also gibt es zwei Lösungen

$$x_1 = -\frac{p}{2} + \sqrt{\frac{p^2}{4} - q} \quad \text{und} \quad x_2 = -\frac{p}{2} - \sqrt{\frac{p^2}{4} - q},$$

oder kurz

$$\boxed{x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}} \quad (p\text{-}q\text{-Formel}) .$$

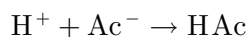
Beispiel 2.3.6 (aus der Chemie): Dissoziation von Essigsäure HAc (hier steht Ac als Abkürzung für den Säurerest der Essigsäure). Beim Auflösen von HAc in Wasser findet eine Aufspaltung von HAc in H^+ und Ac^- statt (Dissoziationsreaktion), kurz



Diese Reaktion findet mit der Reaktionsrate

$$r_{\text{Hin}} = k_{\text{Hin}} c_{\text{HAc}}$$

statt; dabei ist k_{Hin} die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante und c_{HAc} die Konzentration der Essigsäurelösung. Simultan findet auch die Rückreaktion



mit der Rate

$$r_{\text{Rück}} = k_{\text{Rück}} c_{\text{H}^+} c_{\text{Ac}^-}$$

statt. Dieser Prozess läuft solange, bis Hin- und Rückreaktion mit genau der gleichen Rate stattfinden (Chemisches Gleichgewicht). Dann gilt also

$$k_{\text{Hin}} c_{\text{HAc}} = k_{\text{Rück}} c_{\text{H}^+} c_{\text{Ac}^-} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{c_{\text{H}^+} c_{\text{Ac}^-}}{c_{\text{HAc}}} = K$$

mit $K := \frac{k_{\text{Hin}}}{k_{\text{Rück}}} = 1.74 \cdot 10^{-5}$ bei 20°C .

Wie groß ist die Konzentration von H^+ im Gleichgewicht, falls die Konzentration von HAc 0.1 mol/L beträgt und Dissoziation von Wasser vernachlässigt wird?

Sei x die Konzentration von H^+ im Gleichgewicht, d.h. $x = c_{\text{H}^+}$. Da H^+ nur durch Dissoziation von HAc entsteht, gilt $c_{\text{H}^+} = c_{\text{Ac}^-}$. Da bei der Entstehung von H^+ durch Dissoziation ein Molekül HAc verbraucht wird, gilt außerdem $c_{\text{HAc}} = 0.1 - c_{\text{H}^+} = 0.1 - x$. Für die gesuchte Konzentration $x = c_{\text{H}^+}$ gilt also

$$\frac{x^2}{0.1 - x} = K \quad \Leftrightarrow \quad x^2 + Kx - 0.1K = 0$$

mit $K = 1.74 \cdot 10^{-5}$. Diese Gleichung hat die Lösungen

$$\begin{aligned} x &= -\frac{K}{2} \pm \sqrt{\frac{K^2}{4} - (-0.1K)} \\ &= -\frac{1.74}{2} \cdot 10^{-5} \pm \sqrt{\frac{1.74^2}{4} \cdot 10^{-10} + 1.74 \cdot 10^{-6}} \\ &\approx -0.87 \cdot 10^{-5} \pm \sqrt{1.74 \cdot 10^{-6}} \\ &= -0.87 \cdot 10^{-5} \pm \sqrt{1.74} \cdot 10^{-3} \\ &\approx -8.7 \cdot 10^{-6} \pm 1.32 \cdot 10^{-3} \quad \approx \pm 1.32 \cdot 10^{-3} \end{aligned}$$

Chemisch sinnvoll ist nur die positive Lösung

$$x = c_{\text{H}^+} = 1.32 \cdot 10^{-3} \frac{\text{mol}}{\text{L}}.$$

Bemerkung 2.3.7. Die mathematisch exakte Lösung ist: $1.31911 \dots \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}$; die Angabe so vieler Nachkommastellen ist aber nicht sinnvoll; dazu später mehr!

Für die Fälle $n = 3, 4$ existieren ebenfalls Formeln zur Berechnung der Nullstellen der entsprechenden Polynome. Diese sind sehr kompliziert und werden hier nicht angegeben. Für $n \geq 5$ gibt es keine allgemeingültigen exakte Lösungsformeln!

Manchmal kommt man mit folgenden Überlegungen weiter:

- (i) Nur gerade Potenzen von x : Substituiere x^2 durch y .

Beispiel 2.3.8: $x^4 - 3x^2 + 2 = 0$.

$y := x^2$ liefert die quadratische Gleichung $y^2 - 3y + 2 = 0$.

$$\Rightarrow y = \frac{3}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4} - 2} = \frac{3}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4}} = \frac{3}{2} \pm \frac{1}{2}$$

also $y_1 = 1, y_2 = 2$.

$$\Rightarrow x^2 = 1 \text{ oder } x^2 = 2, \text{ also } |x| = 1 \text{ oder } |x| = \sqrt{2}.$$

Damit: $x = \pm 1$ oder $x = \pm \sqrt{2}$ sind alle Lösungen.

- (ii) Wenn eine Nullstelle bekannt ist: Polynomdivision durch Abspalten des entsprechenden Linearfaktors.

Beispiel 2.3.9: $P(x) = x^3 + x^2 - x - 1$

Offensichtlich: $P(x) = 0$ hat als Lösung $x = 1$.

Dann: $P(x) = (x - 1)Q(x)$ mit Polynom Q ; der Grad von Q ist um 1 kleiner.

Berechnung von Q ?	Horner Schema								

[Horner Schema wird in der Übung erklärt und trainiert]

Hier besser: $P(x) = x^2(x + 1) - (x + 1) = (x^2 - 1)(x + 1)$.

2.3.2 Gleichungssysteme

Viele Anwendungen führen zu mehreren Gleichungen mit mehreren Unbekannten.

Beispiel 2.3.10: 10 mL Salzsäure mit dem pH-Wert 2 werden mit 1 L Natronlauge mit dem pH-Wert 11 verrührt. Wie groß ist der pH-Wert nach dem Vermischen, ohne die Berücksichtigung der Reaktion von Na^+ mit Cl^- ?

Betrachte also nur die Reaktion $\text{H}^+ + \text{OH}^- \rightleftharpoons \text{H}_2\text{O}$. Diese läuft solange, bis das chemische Gleichgewicht erreicht ist.

Im Gleichgewicht gilt

$$\frac{c_{\text{H}^+} c_{\text{OH}^-}}{c_{\text{H}_2\text{O}}} = k_W \quad \Leftrightarrow \quad c_{\text{H}^+} c_{\text{OH}^-} = K_W \quad \left(= 10^{-14} \frac{\text{mol}^2}{\text{L}^2} \right).$$

Es fehlt eine weitere Gleichung! Es reagiert genausoviel H^+ wie OH^- , d.h.

$$c_{\text{H}^+}^0 - c_{\text{H}^+} = c_{\text{OH}^-}^0 - c_{\text{OH}^-},$$

dabei bezeichnet c_j^0 die Anfangskonzentration ($j = \text{H}^+, \text{OH}^-$).

Hier sind

$$c_{\text{H}^+}^0 = \frac{0.01 \text{ L} \cdot 10^{-2} \text{ mol/L} + 1 \text{ L} \cdot 10^{-11} \text{ mol/L}}{0.01 \text{ L} + 1 \text{ L}} \approx 10^{-4} \text{ mol/L}.$$

$$c_{\text{OH}^-}^0 = \frac{0.01 \text{ L} \cdot 10^{-12} \text{ mol/L} + 1 \text{ L} \cdot 10^{-3} \text{ mol/L}}{1.01 \text{ L}} \approx 10^{-3} \text{ mol/L}.$$

Wir haben also

$$\begin{aligned} c_{\text{H}^+} c_{\text{OH}^-} &= 10^{-14} \text{ mol}^2/\text{L}^2, \\ c_{\text{OH}^-} - c_{\text{H}^+} &= 9 \cdot 10^{-4} \text{ mol/L}, \end{aligned}$$

zwei Gleichungen mit zwei Unbekannten vom Typ $xy = a$ und $x - y = b$.

Lösungsmethode: Elimination einer Variablen; etwa $y = x - b$ aus der 2. Gleichung in die 1. Gleichung einsetzen.

Dies liefert eine quadratische Gleichung für x :

$$x(x - b) = a \Leftrightarrow x^2 - bx - a = 0$$

$$\Rightarrow x = \frac{b}{2} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4} + a}; \quad \text{nur die Lösung mit „+“ ist } \geq 0!$$

Im Beispiel 2.3.10:

$$\begin{aligned} c_{\text{OH}^-} &= \left(4.5 \cdot 10^{-4} + \sqrt{\frac{81}{4} \cdot 10^{-8} + 10^{-14}} \right) \frac{\text{mol}}{\text{L}} \approx 9 \cdot 10^{-4} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \\ c_{\text{H}^+} &= \frac{10^{-14}}{9 \cdot 10^{-4}} = \frac{10}{9} \cdot 10^{-11} \approx 1.1 \cdot 10^{-11} \frac{\text{mol}}{\text{L}} \end{aligned}$$

Dies liefert: pH-Wert $= -\log(1.1 \cdot 10^{-11}) = -(\log 1.1 - 11) = 11 - \log 1.1 \approx \underline{10.96}$.

Bemerkung 2.3.11. Bei pH-Wert -1 der Säure: $c_{\text{H}}^0 = 0.1 \text{ mol/L}$, $c_{\text{OH}^-}^0 = 10^{-3} \text{ mol/L}$.

$$\begin{aligned} c_{\text{H}} c_{\text{OH}^-} &= 10^{-14}, \quad c_{\text{H}}^0 - c_{\text{OH}^-}^0 = 0.099 \\ c_{\text{H}} &= \frac{0.099}{2} + \sqrt{\left(\frac{0.099}{2} \right)^2 + 10^{-14}} = \underline{0.099} \approx 0.1 \end{aligned}$$

Der pH-Wert nach dem Mischen ist also $+1$

Allgemein: Gegeben sind n algebraische Gleichungen in n Unbekannten. Die gleiche Anzahl ist wichtig für die Lösbarkeit! Oft ist nur eine näherungsweise numerische Berechnung der Lösung(en) möglich. Gelegentlich kann man das System durch Elimination von Variablen auf eine Gleichung mit einer Unbekannten zurückführen, indem man sukzessive eine der Gleichungen nach einer Variablen auflöst und diesen Ausdruck in den anderen Gleichungen einsetzt. Diese Vorgehensweise nennt man „Einsetzungsverfahren“

Nichtlineare Gleichungssysteme

Beispiele 2.3.12:

$$(a) \quad \begin{aligned} 2x - y &= 1 \\ x^2 + y^2 &= 1 \end{aligned}$$

Die 1. Gleichung liefert $y = 2x - 1$. Einsetzen in die 2. Gleichung ergibt

$$\begin{aligned} x^2 + (2x - 1)^2 &= 1 \quad \Leftrightarrow \quad x^2 + 1 - 4x + 4x^2 = 1 \\ \Leftrightarrow \quad 5x^2 - 4x &= 0 \quad \Leftrightarrow \quad x(5x - 4) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = 0 \text{ oder } x = \frac{4}{5} \end{aligned}$$

Einsetzen in die erste Gleichung ergibt die Lösungen $(x, y) = (0, -1)$ und $(x, y) = (\frac{4}{5}, \frac{3}{5})$.

(b) Schnittpunkt zweier Kreise

$$\begin{aligned} x^2 + y^2 &= 4 \\ x^2 + (y - 2)^2 &= 16 \end{aligned}$$

Hier lässt sich x^2 durch Subtraktion der Gleichungen voneinander direkt eliminieren $\Rightarrow y = -2, \quad x = 0$. Warum gibt es hier nur eine Lösung?

(c) Oft liegt ein System von nicht algebraischen Gleichungen vor, die gelegentlich in algebraische Gleichungen überführbar sind.

$$\begin{aligned} \sqrt{x} + \sqrt{x+1} &= y \\ 1 - 2x &= y^2 \\ \Rightarrow \quad 1 - 2x &= (\sqrt{x} + \sqrt{x+1})^2 \Leftrightarrow 1 - 2x = x + 2\sqrt{x}\sqrt{x+1} + x + 1 \\ \Leftrightarrow \quad -4x &= 2\sqrt{x(x+1)} \quad \Leftrightarrow \quad -2x = \sqrt{x(x+1)} \\ \Rightarrow \quad 4x^2 &= x^2 + x \quad \Leftrightarrow \quad 3x^2 - x = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x(3x - 1) = 0 \\ \Leftrightarrow \quad x &= 0 \text{ oder } x = \frac{1}{3}. \end{aligned}$$

Vermutung: Lösungen sind

$$(x, y) = (0, 1) \text{ und } (x, y) = \left(\frac{1}{3}, \sqrt{\frac{1}{3}} + \sqrt{\frac{4}{3}}\right) = \left(\frac{1}{3}, \sqrt{3}\right).$$

Vorsicht! Zwischendurch erfolgten Umformungen, die *keine* Äquivalenzumformungen sind!

Probe liefert: $(0, 1)$ ist eine Lösung, $(\frac{1}{3}, \sqrt{3})$ *nicht*.

(d) Manchmal helfen andere „Tricks“:

$$\begin{aligned} x^4 y + 2y^3 &= 18, \quad x^2 y^2 = 4; \quad x, y \geq 0 \\ xy = 2 &\Rightarrow x^3 + y^3 = 9, \quad \Rightarrow x^3 y^3 = 8, \quad y^3 = \frac{8}{x^3} \\ \underline{z = x^3}, \quad z + \frac{8}{z} &= 9 \quad \Rightarrow \quad \underline{z = 1} \text{ oder } \underline{z = 8}. \end{aligned}$$

Lösungen: $(1, 2)$ und $(2, 1)$.

Es gibt keine vollständige Lösungstheorie für allgemeine Gleichungssysteme. Man beachte auch,

dass eine Lösung einfacher Gleichungen wie $x + e^x = 0$ „elementar“ nicht berechenbar ist; zur numerischen Lösung solcher „transzendenten“ Gleichungen später mehr.

Lineare Gleichungssysteme (siehe auch Kapitel 7)

Für lineare Gleichungssysteme existiert eine vollständige Lösungstheorie. Diese ist Teil der „linearen Algebra“ und wird in einem späteren Kapitel behandelt. Für lineare Systeme mit wenigen Gleichungen ist das Einsetzungsverfahren von oben praktikabel.

Beispiele 2.3.13:

(a) $2x - 3y = 1, \quad x + 2y = 4.$

Die 2. Gleichung liefert $x = 4 - 2y.$

Einsetzen in die 1. Gleichung liefert $2(4 - 2y) - 3y = 1$

$$\Leftrightarrow 8 - 7y = 1 \quad \Leftrightarrow \underline{y = 1} \quad \Rightarrow \quad \underline{x = 2}.$$

(b) $2x - 3y = 1, \quad 6y - 4x = 2.$

Die erste Gleichung liefert $x = \frac{1 + 3y}{2}.$

$$\text{Einsetzen ergibt } 6y - 2(1 + 3y) = 2 \quad \Leftrightarrow \quad -2 = 2.$$

Keine Lösung!

(c) $2x - 3y = 1, \quad 6y - 4x = -2.$

Die erste Gleichung liefert wieder $x = \frac{1 + 3y}{2}$ bzw. $y = \frac{2x - 1}{3}.$

Einsetzen ergibt $6y - 2(1 + 3y) = -2 \quad \Leftrightarrow \quad -2 = -2.$ Das ist immer richtig. Deshalb ergeben sich jetzt unendlich viele Lösungen der Form $(x, y) = (x, \frac{2x-1}{3})!$

Bemerkung 2.3.14. Ein lineares Gleichungssystem von 2 Gleichungen mit 2 Unbekannten kann also offenbar *genau eine* oder *keine* oder *unendlich viele* Lösung(en) haben.

Allgemein: Wann ist das lineare 2×2 -Gleichungssystem

$$ax + by = \alpha$$

$$cx + dy = \beta$$

für jede rechte Seite (α, β) eindeutig lösbar?

Eine formale Rechnung liefert: 2. Gleichung $\Rightarrow y = \frac{\beta - cx}{d}$

Einsetzen in die 1. Gleichung: $ax + b\frac{\beta - cx}{d} = \alpha$

$$\Leftrightarrow adx + b\beta - bcx = \alpha d \quad \Leftrightarrow x(ad - bc) = \alpha d - \beta b$$

$$\Rightarrow x = \frac{\alpha d - \beta b}{ad - bc}, \quad y = \frac{\beta a - \alpha c}{ad - bc}.$$

Die Rechnung ist korrekt, falls $ad - bc \neq 0$ gilt.

Definition 2.3.15. Die Zahl $D := ad - bc$ heißt *Determinante* des Systems, und wird geschrieben als

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = \det \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} := ad - bc.$$

Satz 2.3.16. Gilt $\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \neq 0$, so ist das zugehörige lineare Gleichungssystem für jede rechte Seite (α, β) eindeutig lösbar.

Dasselbe gilt für n Variablen, wobei die Definition und Berechnung der Determinanten deutlich komplizierter ist.

Für $n = 3$ definiert man die Determinante durch

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = aei + bfg + cdh - ceg - afh - bdi.$$

Regel von Sarrus:

$$\begin{array}{ccccccccc} a & & b & & c & & a & & b \\ & \searrow & & \swarrow & & \searrow & & \swarrow & \\ & d & & e & & f & & d & & e \\ & & \swarrow & & \searrow & & \swarrow & & \searrow \\ g & & h & & i & & g & & h \\ - & & - & & - & & + & & + & & + \end{array}$$

Größere Determinanten können durch „Entwicklung“ in kleinere Unterdeterminanten berechnet werden; für $n = 3$:

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a \cdot \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix} \quad \text{„Entwicklung nach der 1. Zeile.“}$$

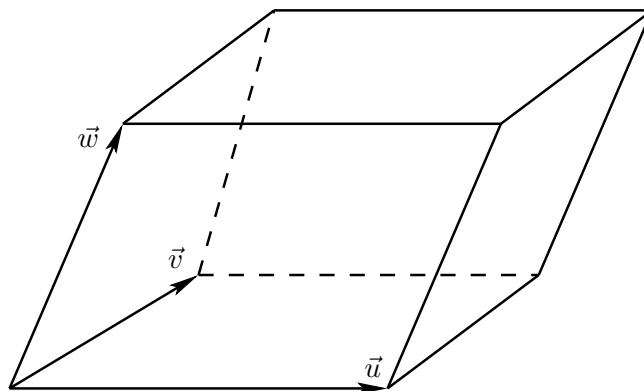
Bemerkung 2.3.17. Speziell die 3×3 -Determinante ist auch wichtig für

(i) Merkregel für das Vektorprodukt

$$\vec{u} \times \vec{v} = \begin{vmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} u_2 v_3 - u_3 v_2 \\ u_3 v_1 - u_1 v_3 \\ u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{pmatrix}$$

(ii) Spatvolumen des durch die Vektoren \vec{u} , \vec{v} und \vec{w} aufgespannten Spates

$$V = |\det(\vec{u}, \vec{v}, \vec{w})| = |\langle \vec{u} \times \vec{v}, \vec{w} \rangle|.$$

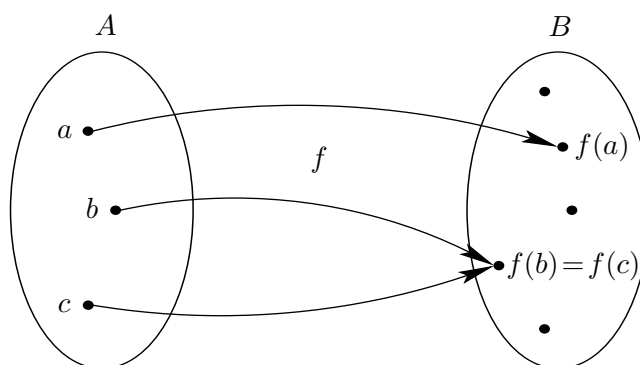


Kapitel 3

Funktionen

3.1 Funktion und Umkehrfunktion

Anschaulich versteht man unter einer Funktion eine Abbildung, die eine Zuordnung zwischen gewissen Objekten herstellt.



Dabei wird jedem Element genau ein Objekt zugeordnet, z.B. ist $f(0) = \pm 1$ ($= \{+1, -1\}$) verboten.

In den naturwissenschaftlichen Anwendungen sind meist Abbildungen zwischen reellen Zahlen von Interesse.

Beispiele 3.1.1: $f(x) = x^2$, $g(x) = \sqrt{x+1}$ oder $y = ax + b$.

Das letzte Beispiel ist nachlässig formuliert; man kann ohne Zusammenhang nur vermuten, dass x die sogenannte unabhängige Variable ist, d.h. $f(x) = ax + b$ gemeint ist.

Definition 3.1.2. Gegeben seien Mengen D_f und B . Unter einer *Funktion*

$$f : D_f \rightarrow B$$

versteht man eine Abbildung, die jedem Element $x \in D_f$ genau ein Element $y = f(x) \in B$ zuordnet. Eine konkrete Funktion wird entweder mit Hilfe einer *Zuordnungsvorschrift* („Formel“) oder durch Aufzählen aller zugeordneten Paare angegeben.

Beispiel 3.1.3: $D_f = \{a, b, c\}$, $B = \{\alpha, \beta, \gamma\}$,

$$f : D_f \rightarrow B \text{ mit } f(a) = \alpha, f(b) = \beta, f(c) = \gamma.$$

Bemerkung 3.1.4. Sei $f : D_f \rightarrow B$ eine Funktion mit der Zuordnungsvorschrift $y = f(x)$, dann heißt x *Argument* oder *unabhängige Variable*, y *abhängige Variable*, $f(x)$ *Funktionswert* bzw. Wert von f an der Stelle x und D_f *Definitionsbereich* von f . Man unterscheidet zwischen der *Bildmenge* (bzw. dem *Bildbereich*) B und dem *Wertebereich* $W_f \subset B$. W_f ist die Menge aller Funktionswerte $f(x)$ für $x \in D_f$, d.h. $W_f = \{f(x) : x \in D_f\} =: f(D_f)$.

Oft ist D_f nicht explizit angegeben; dann verwendet man den sogenannten „maximalen Definitionsbereich“ (gelegentlich als D_{\max} bezeichnet), d.h. die größte Menge, für welche die Zuordnungsvorschrift definiert ist.

Beispiele 3.1.5:

(a) $f(x) = \frac{1}{x^2 - 1}$ hat den maximalen Definitionsbereich $D_f = \mathbb{R} \setminus \{-1, 1\}$.

(b) $g(x) = \sqrt{x+1}$ hat den maximalen Definitionsbereich $D_g = [-1, \infty)$.

Dabei muß allerdings aus dem Zusammenhang hervorgehen, aus welcher Grundmenge die Variable x überhaupt stammt: $g : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ mit $g(x) = \sqrt{x+1}$ hat als Abbildung mit den komplexen Zahlen als Variablen den maximalen Definitionsbereich $D_g = \mathbb{C}$!

Zur anschaulichen Darstellung einer Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ verwendet man den (Funktions-) Graphen von f .

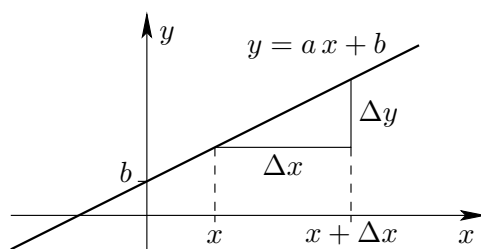
Definition 3.1.6. Der Graph einer Funktion $f : D_f \rightarrow B$ ist die Menge

$$\text{gr}(f) = \{(x, y) : x \in D_f, y = f(x)\}.$$

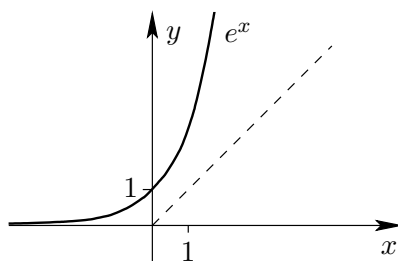
Im Fall $f : D_f \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ ist $\text{gr}(f)$ eine Teilmenge der Ebene \mathbb{R}^2 , lässt sich also bildlich darstellen.

Beispiele 3.1.7:

$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = ax + b$. $W_f = \mathbb{R}$, falls $a \neq 0$.



$f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = e^x$. $W_f = (0, \infty)$.



Oft ist es wünschenswert, dass die Zuordnung $f : D_f \rightarrow W_f$ *eineindeutig* ist, d.h. dass zu jedem Bildpunkt $y \in W_f$ nur ein Urbild $x \in D_f$ gehört.

Definition 3.1.8. Eine Funktion $f : D_f \rightarrow B$ heißt

injektiv (eineindeutig), falls $x \neq \tilde{x} \Rightarrow f(x) \neq f(\tilde{x})$ gilt,

surjektiv, falls $W_f = B$ gilt,

bijektiv, falls f injektiv und surjektiv ist.

Bemerkungen 3.1.9:

- (i) $f : D_f \rightarrow B$ ist injektiv, falls gilt: $f(x) = f(\tilde{x}) \Rightarrow x = \tilde{x}$.
- (ii) $f : D_f \rightarrow W_f$ ist stets surjektiv, denn $W_f = f(D_f)$ nach Definition.

Diese Begriffe sind deshalb wichtig, weil jede bijektive Funktion umkehrbar ist!

Definition 3.1.10. Sei $f : D_f \rightarrow W_f$ eine injektive Funktion. Die Funktion $g : W_f \rightarrow D_f$, die jedem $y \in W_f$ genau das $x \in D_f$ zuordnet, für welches $y = f(x)$ gilt, heißt *Umkehrfunktion* von f ; geschrieben als $g = f^{-1}$.

Bemerkungen 3.1.11:

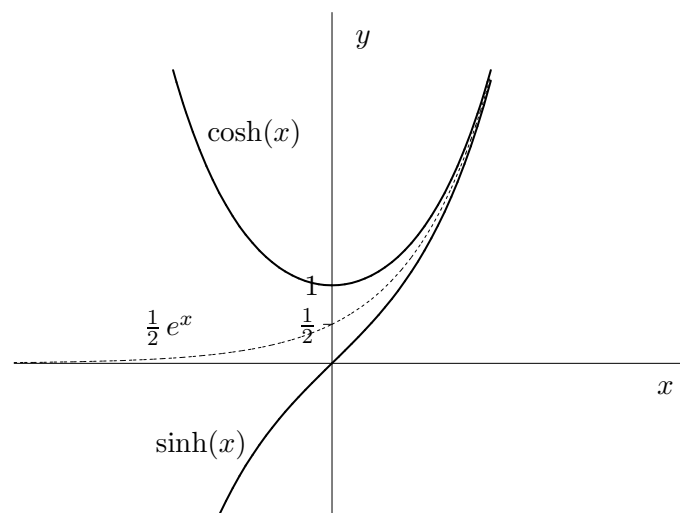
- (i) Für f^{-1} gilt also $f(f^{-1}(y)) = y \quad \forall y \in W_f$ sowie $f^{-1}(f(x)) = x \quad \forall x \in D_f$.
- (ii) Die Zuordnungsvorschrift für f^{-1} lässt sich oft durch Auflösen der Gleichung $y = f(x)$ nach x angeben.

Beispiel 3.1.12: Hyperbolische Funktionen:

$$\text{Sinus hyperbolicus:} \quad \sinh x := \frac{e^x - e^{-x}}{2} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}$$

$$\text{Cosinus hyperbolicus:} \quad \cosh x := \frac{e^x + e^{-x}}{2} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}$$

Der Name kommt von der Beziehung $(\cosh x)^2 - (\sinh x)^2 = 1$, denn $y^2 - x^2 = 1$ ist die Gleichung für eine Hyperbel.



Betrachte $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = \cosh x$. Dann gilt $W_f = [1, \infty)$.

Problem: $f : \mathbb{R} \rightarrow W_f$ ist *nicht* injektiv, denn $f(x) = f(-x)$, $\forall x \in \mathbb{R}$. Ähnlich wie bei $y = x^2$ kann nur nach Einschränkung der Funktion auf den kleineren Definitionsbereich

$$D_f = \mathbb{R}_+ \quad (= [0, \infty))$$

invertiert werden!

$f : D_f = \mathbb{R}_+ \rightarrow W_f = [1, \infty)$ ist bijektiv.

Berechnung von f^{-1} : $y = \frac{e^x + e^{-x}}{2}$ nach x auflösen.

Substituiere $z = e^x$. Dann: $z + \frac{1}{z} = 2y$ mit $z > 0$.

$$\Leftrightarrow z^2 + 1 = 2zy \quad \Leftrightarrow z^2 - 2zy + 1 = 0 \quad \Leftrightarrow (z - y)^2 = y^2 - 1$$

$$\Leftrightarrow |z - y| = \sqrt{y^2 - 1}.$$

Zunächst zwei Lösungen: $z = y + \sqrt{y^2 - 1}$ und $z = y - \sqrt{y^2 - 1}$.

Welche Lösung liefert f^{-1} ? Wir haben: $z = e^x$ mit $x \in D_f$, also $x \geq 0$

$$\Rightarrow z \geq 1. \quad \text{Es ist } y - \sqrt{y^2 - 1} < 1 \quad \text{für } y \in W_f.$$

Also

$$(e^x =) z = y + \sqrt{y^2 - 1} \quad \Rightarrow \quad f^{-1}(y) = \ln(y + \sqrt{y^2 - 1}).$$

Bezeichnung: $\operatorname{arcosh} x := \ln(x + \sqrt{x^2 - 1})$ für $x \geq 1$ *Areacoshyperbolicus*.

Beispiel 3.1.13: $f(x) = x^2 - 4x + 1 = (x - 2)^2 - 3$

Offensichtlich ist f *nicht* bijektiv!

Es ist $W_f = [-3, \infty)$, aber $f : \mathbb{R} \rightarrow W_f$ ist *nicht* injektiv!

Wie bei $y = x^2$ kann f nur durch Einschränkung auf einen kleineren Definitionsbereich, etwa auf $[2, \infty)$, invertiert werden!

Sei also $D_f := [2, \infty)$. Dann ist

$f : D_f \rightarrow W_f = [-3, \infty)$ bijektiv.

Berechnung von f^{-1} :

$y = x^2 - 4x + 1$ für $y \geq -3$ nach x auflösen.

$$\Leftrightarrow y = (x - 2)^2 - 3 \Leftrightarrow (x - 2)^2 = y + 3.$$

Zunächst zwei Lösungen:

$$x = 2 - \sqrt{y + 3} \quad \text{und} \quad x = 2 + \sqrt{y + 3}.$$

Es muss $x \in D_f$ (also $x \geq 2$) gelten! Daher

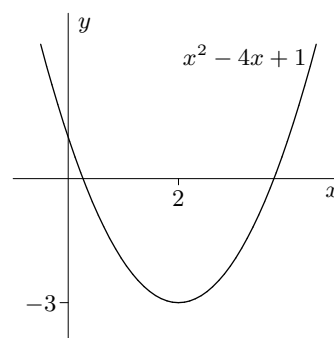
$$x = 2 + \sqrt{y + 3}, \quad \text{d.h. } f^{-1}(y) = 2 + \sqrt{y + 3}.$$

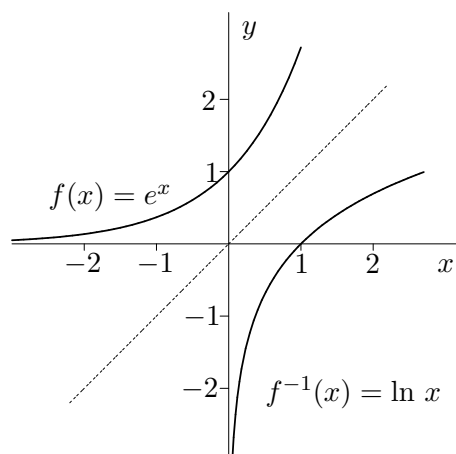
Fazit: $f^{-1} : [-3, \infty) \rightarrow [2, \infty)$ mit $f^{-1}(x) = 2 + \sqrt{x + 3}$.

Es gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{gr}(f^{-1}) &= \{(y, x) : y \in W_f, x = f^{-1}(y)\} = \{(y, x) : y \in W_f, y = f(x)\} \\ &= \{(y, x) : (x, y) \in \operatorname{gr}(f)\}, \end{aligned}$$

d.h. $\operatorname{gr}(f^{-1})$ entsteht aus $\operatorname{gr}(f)$ durch Spiegelung an der Winkelhalbierenden.



Beispiel 3.1.14:

Viele der in den Anwendungen auftretenden Funktionen haben zusätzliche Eigenschaften, etwa Monotonie oder Symmetrie.

Definition 3.1.15. Eine Funktion $f : D_f \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ heißt

- (i) *beschränkt*, falls $|f(x)| \leq M$, $\forall x \in D_f$ mit einer „Schranke“ $M > 0$ gilt.
- (ii) *gerade*, falls $f(-x) = f(x)$, $\forall x \in D_f$ gilt.
- (iii) *ungerade*, falls $f(-x) = -f(x)$, $\forall x \in D_f$ gilt.
- (iv) *(streng) monoton wachsend*, falls gilt:

$$x_1 < x_2 \Rightarrow f(x_1) \leq f(x_2) \quad (f(x_1) < f(x_2)).$$

- (v) *(streng) monoton fallend*, falls gilt:

$$x_1 < x_2 \Rightarrow f(x_1) \geq f(x_2) \quad (f(x_1) > f(x_2)).$$

- (vi) *periodisch* (mit der Periodenlänge L), falls $f(x + L) = f(x)$ $\forall x \in D_f = \mathbb{R}$.

Bemerkungen 3.1.16:

- (i) $f : D_f \subset \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ heißt (streng) monoton, falls f (streng) monoton wachsend oder fallend ist.
- (ii) Eine streng monotone Funktion $f : D_f \subset \mathbb{R} \rightarrow W_f \subset \mathbb{R}$ ist automatisch injektiv, also umkehrbar.

Abschließend einige der für die Chemie wichtigen Funktionstypen.

- (a) *Direkte Proportionalität:* $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = ax$.

Dabei ist $a \in \mathbb{R}$ die Proportionalitätskonstante.

Beispiel 3.1.17: Reaktionsrate r einer Reaktion $A \rightarrow B$ erster Ordnung: $r \sim c_A$, also $r = f(c_A)$ mit $f(x) = kx$, $k > 0$ Reaktionsgeschwindigkeitskonstante.

Beachte: Für kompliziertere Reaktionen treten Funktionen mehrerer Variablen auf! Für $A + B \rightarrow P$ etwa ist die Reaktionsrate r durch $k = c_A c_B$ gegeben.

Hier ist also $f(x, y) = kxy$.

- (b) *Umgekehrte Proportionalität:* $f : \mathbb{R} \setminus \{0\} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = \frac{a}{x}$.

Beispiel 3.1.18: Die allgemeine Gasgleichung für ein ideales Gas lautet

$$\frac{pV}{T} = nR$$

mit p = Druck, V = Volumen, T = Temperatur, n = Teilchenanzahl, R = allgemeine Gaskonstante.

Für konstantes T (*isotherm*) gilt $p \sim \frac{1}{V}$ mit der Proportionalitätskonstante $a = \frac{nR}{T}$.

Auch hier treten im allgemeinen Fall Funktionen mehrerer Veränderlicher auf, etwa

$$V = f(p, T) \quad \text{mit } f(x, y) = nRy/x \quad \text{für } x, y > 0.$$

- (c) *Linearer Zusammenhang:* $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = ax + b$

Beispiel 3.1.19 (freie Enthalpie): $H = U + pV$ mit U = innere Energie (diese sei konstant). Für $p = \text{const}$ (isobar) bzw. $V = \text{const}$ (isochor) ergibt sich ein linearer Zusammenhang.

- (d) *Potenz mit „gebrochenem Exponenten“:* $f : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = kx^\alpha$ mit $\alpha > 0$.

Beispiele 3.1.20:

(i) Reaktionen gebrochener Ordnung.

(ii) Zustandsgleichung realer Gase: $p = A\rho^\alpha$ mit ρ = Dichte, A Proportionalitätskonstante und dem Exponent $\alpha > 1$; etwa $\alpha = 1.4$ für Luft, $\alpha = 1.67$ für Helium ($\alpha = 1 + 2/f$ mit f = Anzahl der Freiheitsgrade des Gasmoleküls).

- (e) *Funktionen der Form* $\ln y = -\frac{a}{x} + b$:

Beispiel 3.1.21: Arrhenius-Ansatz zur Beschreibung der Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit

$$r(T) = a_0 e^{-E_a/(RT)}$$

mit E_a = Aktivierungsenergie, T = Temperatur

$$\Rightarrow y = a_0 e^{-\alpha/x} \Rightarrow \ln y = \ln a_0 + \ln(e^{-\alpha/x}) = -\frac{\alpha}{x} + \beta \quad \text{mit } \beta := \ln a_0.$$

Bemerkung 3.1.22. Zur Bestimmung der auftretenden Konstanten ist es oft vorteilhaft zu „linearisieren“ (Vorsicht mit dem Begriff), d.h. neue Variablen so einzuführen, dass ein linearer Zusammenhang (wie in (c)) entsteht.

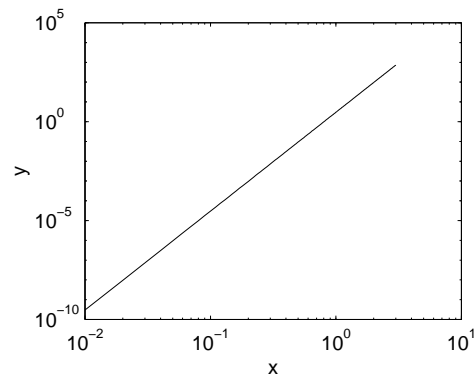
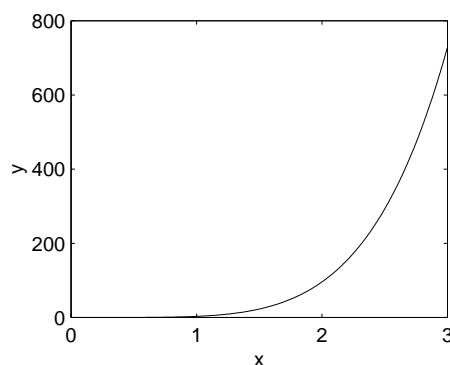
Beispiele:

1. $y = a/x, \tilde{y} = y \Rightarrow \tilde{y} = a\tilde{x},$
2. $y = k x^\alpha:$
 - (a) $\ln y = \ln k + \alpha \ln x, \text{ also } \tilde{x} = \ln x, \tilde{y} = \ln y \Rightarrow \tilde{y} = \alpha \tilde{x} + \ln k,$
oder mit dekadischem Logarithmus
 - (b) $\log y = \log k + \alpha \log x, \text{ also } \tilde{x} = \log x, \tilde{y} = \log y \Rightarrow \tilde{y} = \alpha \tilde{x} + \log k,$
3. $y = a_0 e^{-\alpha/x}:$

$$\ln y = -\frac{\alpha}{x} + \ln a_0, \text{ also } \tilde{x} = 1/x, \tilde{y} = \ln y \Rightarrow \tilde{y} = -\alpha \tilde{x} + \ln a_0.$$

Vorteil: Nach graphischem Auftragen von \tilde{y} gegen \tilde{x} aus Messwerten sollten die Punkte in etwa auf einer Geraden liegen. Dann kann die Steigung und der Achsenabschnitt der Geraden aus der Zeichnung ermittelt werden! Zur Bestimmung der „besten“ ausgleichenden Geraden später mehr.

Beispiel 3.1.23: Die Funktion $f(x) = 3x^5$ wird für das Intervall $[0, 3]$ nach 2. (b) in verschiedenen Darstellungen gezeigt:



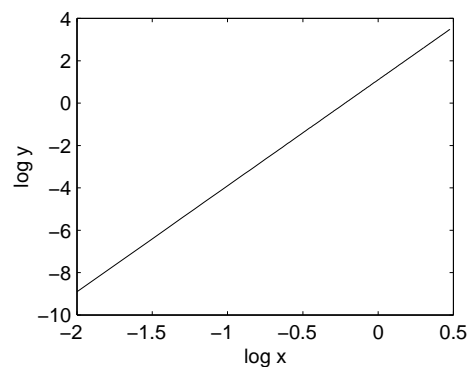
$$y = 3x^5$$

Oben links: Kartesische Koordinaten

Oben rechts: Doppelt logarithmisch

Unten rechts:

Logarithmierte kartesische Darstellung



3.2 Komplexe Zahlen und trigonometrische Funktionen

Problem: Es gibt quadratische Gleichungen ohne (reelle) Lösungen, etwa

$$x^2 + 1 = 0.$$

Ähnliche Probleme hatten wir schon früher:

$x + 1 = 0$ hat keine Lösung $x \in \mathbb{N}$; deshalb wurde \mathbb{Z} eingeführt.

$nx = 1$ mit $n \geq 2$ hat keine Lösung $x \in \mathbb{Z}$; deshalb wurde \mathbb{Q} eingeführt.

$x^2 = 2$ hat keine Lösung $x \in \mathbb{Q}$; deshalb wurde \mathbb{R} eingeführt.

Da es keine reelle Zahl x mit $x^2 = -1$ gibt, definiert man eine neue Zahl i durch die Festlegung

$$i^2 = -1 \quad (\text{also ist } i \text{ im Prinzip ein Ersatz für } \sqrt{-1})$$

Dann kann man die Gleichung

$$x^2 + p \cdot x + q = 0$$

auch im Fall $D := p^2/4 - q < 0$ (zunächst formal) lösen:

$$x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{D} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{q - p^2/4} \sqrt{-1} = -\frac{p}{2} \pm i \sqrt{q - p^2/4}.$$

Dieser Typ Zahl hat die Form $a + ib$ mit $a, b \in \mathbb{R}$.

Definition 3.2.1. Unter einer *komplexen Zahl* z versteht man eine Zahl der Form $z = x + iy$ mit $x, y \in \mathbb{R}$ und $i^2 = -1$. Dabei heißt x der *Realteil* von z (kurz $\operatorname{Re} z$), und y der *Imaginärteil* von z (kurz $\operatorname{Im} z$); i heißt auch imaginäre Einheit.

Für die Menge aller komplexen Zahlen schreiben wir \mathbb{C} , d.h.

$$\boxed{\mathbb{C} = \{x + i \cdot y : x, y \in \mathbb{R}\} \quad \text{mit} \quad i^2 = -1.}$$

Für zwei komplexe Zahlen $z_1 = x_1 + iy_1$ und $z_2 = x_2 + iy_2$ definieren wir

- (i) $z_1 = z_2 \quad :\Leftrightarrow \quad x_1 = x_2 \text{ und } y_1 = y_2$
- (ii) $z_1 + z_2 := (x_1 + x_2) + i(y_1 + y_2)$
- (iii) $z_1 z_2 := x_1 x_2 - y_1 y_2 + i(x_1 y_2 + x_2 y_1)$

Die Regeln (ii) und (iii) besagen, dass mit i wie mit einer reellen Zahl gerechnet wird, wobei aber $i^2 = -1$ zu beachten ist.

Beispiel 3.2.2:

$$z_1 = 1 + 2i, z_2 = -2 - i \quad \Rightarrow \quad z_1 + z_2 = -1 + i, z_1 z_2 = -5i.$$

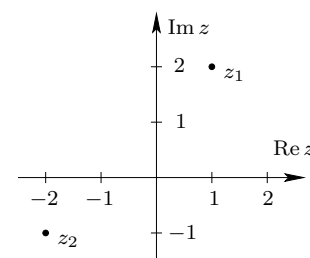
Da komplexe Zahlen aus zwei unabhängigen Anteilen bestehen, kann man sie mit Punkten der Ebene identifizieren.

$$z = x + iy \in \mathbb{C} \quad \leftrightarrow \quad (x, y) \in \mathbb{R}^2$$

Man erweitert dadurch den reellen Zahlenstrahl zur komplexen Zahlenebene, der sogenannten *Gauß'schen Zahlenebene*.

Eine wichtige Operation ist die Spiegelung an der reellen Achse, d.h. der Übergang von $z = x + iy$ zu $\bar{z} := x - iy$, der zu z *konjugiert komplexen Zahl*. Die Bedeutung von \bar{z} ergibt sich aus der Gleichung $z\bar{z} = (x + iy)(x - iy) = x^2 + y^2 \in \mathbb{R}$! Nach Pythagoras ist $\sqrt{z\bar{z}}$ der Abstand der komplexen Zahl z vom Ursprung. Analog zum Reellen heißt dieser Wert *Betrag von z* , geschrieben als $|z|$. Also gilt $z\bar{z} = |z|^2$ und damit für $z \neq 0$, d.h. für $x \neq 0$ oder $y \neq 0$:

$$\frac{1}{z} = \frac{1}{|z|^2} \bar{z} = \frac{x - iy}{x^2 + y^2}.$$



Definition 3.2.3. Für $z = x + iy \in \mathbb{C}$ definieren wir

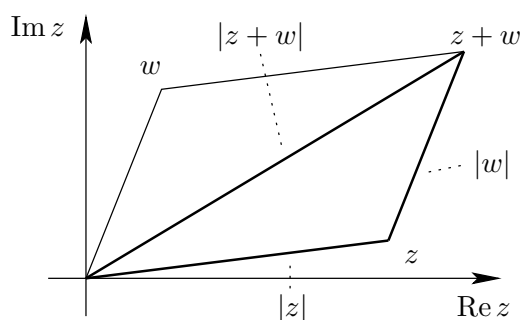
- (i) $\bar{z} := x - iy$ (konjugierte komplexe Zahl)
- (ii) $|z| := \sqrt{z\bar{z}} = \sqrt{x^2 + y^2}$ (Betrag von z)
- (iii) Für $z \neq 0$: $z^{-1} = \frac{1}{z}$ als Lösung von $z^{-1}z = 1$ (Inverse von z bzgl. Multiplikation)
- (iv) Für $z_2 \neq 0$: $\frac{z_1}{z_2} = z_1 \frac{1}{z_2}$

Beispiel 3.2.4: $z = 1 + 2i$, $\bar{z} = 1 - 2i$, $z\bar{z} = 5$, $|z| = \sqrt{5}$, $\frac{1}{z} = \frac{1}{5} - \frac{2}{5}i$

Bemerkungen 3.2.5:

- (i) Für $|\cdot|$ gilt $|z| = 0 \Leftrightarrow z = 0$, $|z \cdot w| = |z| \cdot |w|$ und $|z + w| \leq |z| + |w|$

Der Name Dreiecksungleichung für die letztgenannte Ungleichung erklärt sich aus folgender Skizze:



- (ii) Die komplexen Zahlen sind *nicht* angeordnet, d.h. es gibt keine Relation „ $<$ “ auf \mathbb{C} !
- (iii) Betrachtet man Polynome über \mathbb{C} , also

$$P(z) = z^n + a_{n-1}z^{n-1} + \dots + a_1z + a_0 \text{ mit Koeffizienten } a_k \in \mathbb{C},$$

so besitzt jedes Polynom vom Grad n *genau n komplexe Nullstellen*, wobei mehrfache Nullstellen (d.h. Faktorisierung mit Faktor $(z - z_0)^k$) mit ihrer Vielfachheit (also k) zu zählen sind. Bei Polynomen mit reellen Koeffizienten treten komplexe Nullstellen immer in konjugiert komplexen Paaren (also z_0 und \bar{z}_0) auf.

Beispiele 3.2.6:

(a)

$$z^3 + 1 = (z + 1)(z^2 - z + 1) = (z + 1) \left(z - \frac{1}{2} - i \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left(z - \frac{1}{2} + i \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$$

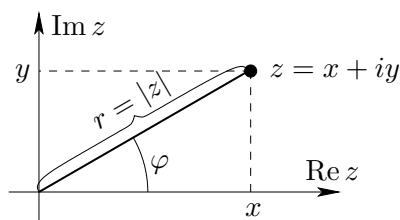
hat die Nullstellen $z_1 = -1$, $z_{2,3} = \frac{1}{2} \pm i \frac{\sqrt{3}}{2}$; alle einfach.

(b)

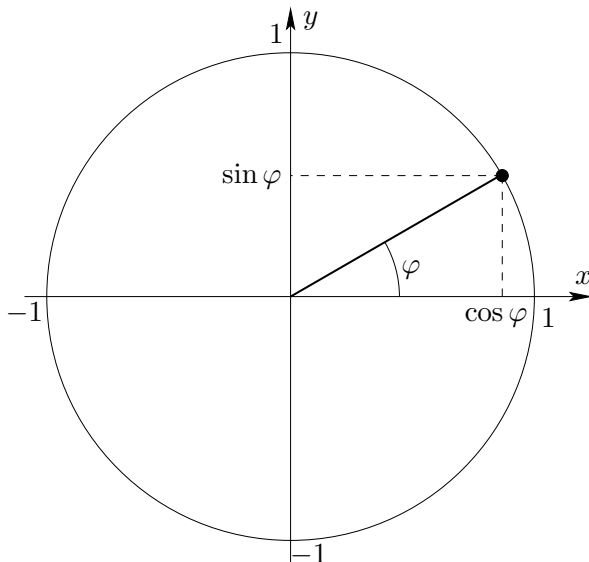
$$\begin{aligned} z^3 + iz^2 + z + i &= z^3 + z + i(z^2 + 1) = (z + i)(z^2 + 1) \\ &= (z + i)(z + i)(z - i) \\ &= (z + i)^2(z - i) \end{aligned}$$

hat die Nullstellen $z_1 = z_2 = -i$ (zweifach) und $z_3 = i$ (einfach).

Da komplexe Zahlen den Punkten in der Gauß'schen Zahlenebene entsprechen, lässt sich jedes $z \in \mathbb{C}$ auch in *Polarkoordinaten* durch Angabe einer Länge und eines Winkels darstellen.



Dazu benötigen wir die trigonometrischen Funktionen Sinus und Cosinus.



Definition 3.2.7. Es seien x, y die Koordinaten des Punktes P auf dem Einheitskreis, für den der Winkel von der positiven reellen Halbachse aus (im Bogenmaß) gerade φ beträgt (Winkel math. positiv, also gegen den Uhrzeigersinn). Dann definieren wir:

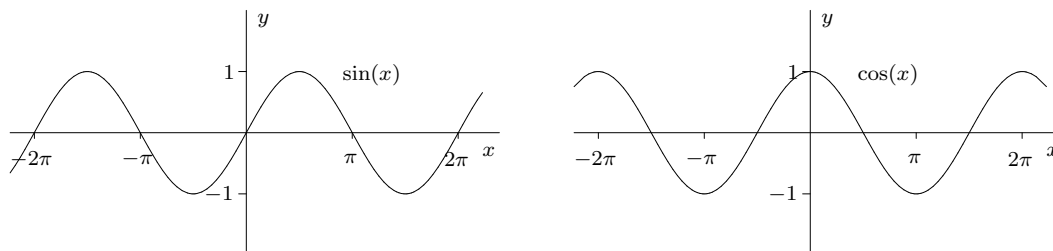
$$\sin \varphi := y \quad \text{und} \quad \cos \varphi := x.$$

Dadurch sind $\sin \varphi$ und $\cos \varphi$ für Winkel $\varphi \in [0, 2\pi)$ erklärt. Für andere Werte $\varphi \in \mathbb{R}$ definieren wir

$$\sin \varphi := \sin(\varphi - 2k\pi) \quad \text{und} \quad \cos \varphi := \cos(\varphi - 2k\pi),$$

wobei $k \in \mathbb{Z}$ so gewählt ist, dass $\varphi - 2 \cdot k\pi \in [0, 2\pi)$ gilt.

Bemerkung 3.2.8. Die Funktionen $\sin \varphi$ und $\cos \varphi$ entstehen also durch 2π -periodische Fortsetzung der Verläufe im Bereich $[0, 2\pi)$.



Fazit: Die Zahl $z = x + iy \in \mathbb{C}$ hat die *Polarkoordinatendarstellung*

$$z = r(\cos \varphi + i \sin \varphi)$$

mit dem Radius $r = |z|$ und dem Winkel φ zwischen „ \mathbb{R}_+ und z “ (in Rad).

Die Zahl φ heißt *Argument* von z , kurz $\arg(z)$. Da es beim Winkel auf Vielfache von 2π nicht ankommt, hat man mehrere Möglichkeiten, das Intervall für $\arg(z)$ festzulegen. Oft definiert man $\arg(z)$ als den Winkel φ , für den $z = |z|(\cos \varphi + i \sin \varphi)$ und $-\pi < \varphi \leq \pi$ gilt.

Eigenschaften von $\sin x$ und $\cos x$.

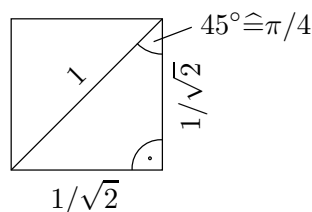
Unmittelbar aus der Definition folgt

$$\sin^2 x + \cos^2 x = 1 \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (\text{Pythagoras})$$

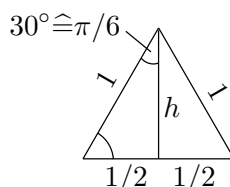
$$\sin 0 = 0, \quad \cos 0 = 1$$

$$\sin \frac{\pi}{2} = 1, \quad \cos \frac{\pi}{2} = 0$$

$$\sin \frac{\pi}{4} = \cos \frac{\pi}{4} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$



$$\sin \frac{\pi}{6} = \frac{1}{2}, \quad \cos \frac{\pi}{6} = \frac{\sqrt{3}}{2}$$



$$\frac{1}{4} + h^2 = 1$$

Additionstheoreme:

$$\sin(x + y) = \sin x \cos y + \cos x \sin y \quad \forall x, y \in \mathbb{R}$$

$$\cos(x + y) = \cos x \cos y - \sin x \sin y \quad \forall x, y \in \mathbb{R}$$

Folgerungen:

$$\sin(x + \pi/2) = \cos x, \quad \cos(x + \pi/2) = -\sin x$$

$$\sin(x + \pi) = -\sin x, \quad \cos(x + \pi) = -\cos x$$

$$\sin 2x = 2 \sin x \cos x$$

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

Bemerkungen 3.2.9:

- (i) Ist α ein Winkel in Gradmaß (also 360° für den Vollkreis), so muss zur Berechnung von Sinus und Cosinus α erst ins Bogenmaß umgerechnet werden, d.h. $x = \alpha \frac{2\pi}{360^\circ}$; etwa $\sin 60^\circ = \sin \frac{\pi}{6} = \frac{1}{2}$.

- (ii) Die Exponentialfunktion e^z kann auch für komplexe $z \in \mathbb{C}$ definiert werden (als sog. Potenzreihe; dazu später mehr).

Es gilt dann das *Euler'sche Theorem*

$$e^{i\varphi} = \cos \varphi + i \sin \varphi \quad \text{für } \varphi \in \mathbb{R};$$

dies kann auch als Definition von $e^{i\varphi}$ verwendet werden. Damit folgt

$$e^z = e^{x+iy} = e^x (\cos y + i \sin y) \quad \text{für } z = x + iy \in \mathbb{C}.$$

Für die komplexe e -Funktion gilt wie im Reellen

$$e^{z+w} = e^z e^w \quad \forall z, w \in \mathbb{C}.$$

Setzt man speziell $z = ix$ und $w = iy$ ein, so erhält man mit Hilfe des Euler'schen Theorems die Additionstheoreme.

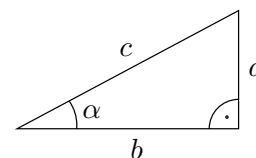
- (iii) Für $z_1 = r_1 e^{i\varphi_1}$, $z_2 = r_2 e^{i\varphi_2} \in \mathbb{C}$ gilt $z_1 z_2 = r_1 r_2 e^{i(\varphi_1 + \varphi_2)}$. Also werden bei der Multiplikation zweier komplexer Zahlen die Beträge (Längen) multipliziert und die Argumente (Winkel) addiert.

In Anwendungen verwendet man die Winkelfunktionen oft zur Längenberechnung. Dabei benutzt man folgende Zusammenhänge:

1. In rechtwinkligen Dreiecken gilt:

$$\sin \alpha = \frac{a}{c} = \frac{\text{Gegenkathete}}{\text{Hypotenuse}}$$

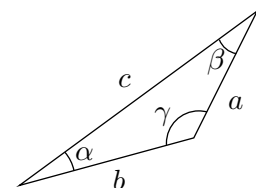
$$\cos \alpha = \frac{b}{c} = \frac{\text{Ankathete}}{\text{Hypotenuse}}$$



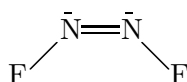
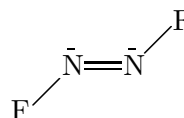
2. In beliebigen Dreiecken gilt:

$$\text{Sinussatz: } \frac{\sin \alpha}{a} = \frac{\sin \beta}{b} = \frac{\sin \gamma}{c}$$

$$\text{Cosinussatz: } c^2 = a^2 + b^2 - 2 \cdot a \cdot b \cos \gamma$$



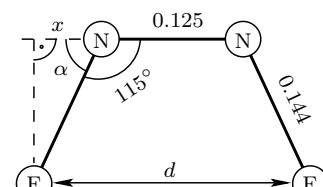
Beispiel 3.2.10: Die Verbindung N_2F_2 existiert in zwei räumlich verschiedenen Formen (Isomeren):

Cis-N₂F₂Trans-N₂F₂

Bei beiden Isomeren beträgt der N-N-Abstand 0.125 nm, der N-F-Abstand 0.144 nm und die F-N-N-Winkel 115°. Welchen Abstand haben die Fluoratome?

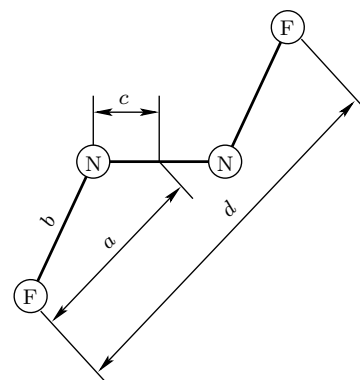
(a) Im Cis-Isomer:

$$\begin{aligned} d &= 2x + 0.125; \\ \alpha &= 180^\circ - 115^\circ = 65^\circ, \\ \cos \alpha &= \frac{x}{0.144} \\ \Rightarrow d &= 0.125 \text{ nm} + 2 \cdot 0.144 \text{ nm} \cdot \cos 65^\circ = 0.247 \text{ nm}. \end{aligned}$$



(b) Im Trans-Isomer:

$$\begin{aligned} b &= 0.144, \quad c = \frac{0.125}{2}, \quad d = 2a. \\ \text{Cosinussatz: } a^2 &= b^2 + c^2 - 2bc \cos 115^\circ \\ \Rightarrow a^2 &= 0.0322 \text{ nm}^2, \quad a = 0.180 \text{ nm} \\ \Rightarrow d &= 0.360 \text{ nm}. \end{aligned}$$



Weitere trigonometrische Funktionen:

Mittels Sinus und Cosinus definiert man

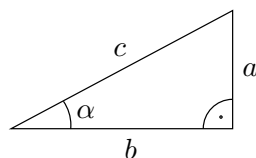
$$\tan x = \frac{\sin x}{\cos x} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \left\{ \frac{\pi}{2} + n\pi : n \in \mathbb{Z} \right\}$$

und

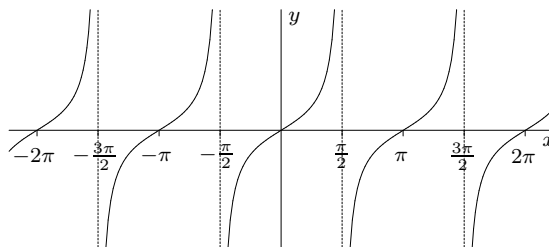
$$\cot x = \frac{\cos x}{\sin x} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \{n\pi : n \in \mathbb{Z}\}.$$

Anschaulich:

$$\tan \alpha = \frac{a}{b}, \quad \cot \alpha = \frac{b}{a}.$$



Die Tangensfunktion ist π -periodisch, ungerade und im Intervall $(-\pi/2, \pi/2)$ streng monoton wachsend.



Der Graph des Cotangens ergibt sich aus dem Zusammenhang

$$\tan(x + \pi/2) = \frac{\sin(x + \pi/2)}{\cos(x + \pi/2)} = \frac{\cos x}{-\sin x} = -\cot x.$$

Zu Winkelberechnungen benötigt man oft Umkehrfunktionen der trigonometrischen Funktionen. Da letztere nicht injektiv sind, kann man die Inversen nur nach Einschränkung auf einen geeigneten Definitionsbereich erklären.

- (a) Arcussinusfunktion
- $y = \arcsin x$

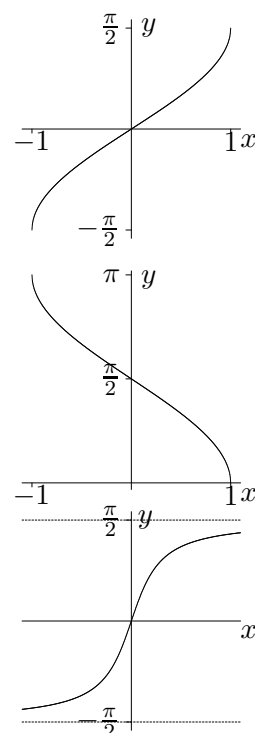
Die Umkehrfunktion von $f(x) = \sin x$
im Monotonieintervall $-\frac{\pi}{2} \leq x \leq \frac{\pi}{2}$.

- (b) Arcuscosinusfunktion
- $y = \arccos x$

Die Umkehrfunktion von $f(x) = \cos x$
im Monotonieintervall $0 \leq x \leq \pi$.

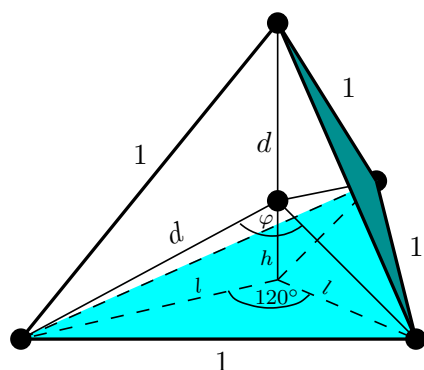
- (c) Arcustangensfunktion
- $y = \arctan x$

Die Umkehrfunktion von $f(x) = \tan x$
im Monotonieintervall $-\frac{\pi}{2} < x < \frac{\pi}{2}$.

**Beispiel 3.2.11:** Berechnung des *Tetraederwinkels*.

Räumliche Struktur gewisser Kristalle bzw. Moleküle, etwa Methan (CH_4)
aber auch Wasser (verzerrter Tetraederwinkel 104.5°).

Gesamthöhe: $H = d + h$



φ lässt sich aus d berechnen:

$$1 = 2d^2 - 2d^2 \cos \varphi \quad (\text{Cosinussatz}).$$

Pythagoras: $d^2 = l^2 + h^2$. Eliminiere h :

$$\begin{aligned} d^2 - h^2 &= l^2 \Rightarrow (d - h)H = l^2 \\ \Rightarrow d - h &= \frac{l^2}{H}, \quad d + h = H \\ \Rightarrow d &= \frac{1}{2} \left(H + \frac{l^2}{H} \right) \end{aligned}$$

Berechne l : $1 = 2l^2 - 2l^2 \cos 120^\circ$ (Cosinussatz); $\cos 120^\circ = -\sin 30^\circ = -\frac{1}{2} \Rightarrow l^2 = \frac{1}{3}$.

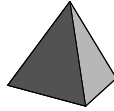
Berechne H : $l^2 + H^2 = 1 \Rightarrow H^2 = \frac{2}{3}, \quad H = \sqrt{\frac{2}{3}}$

$$\Rightarrow d = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2}}, \quad d^2 = \frac{3}{8}, \quad 2d^2 = \frac{3}{4} \Rightarrow 1 - \cos \varphi = \frac{4}{3}$$

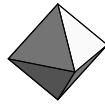
$$\cos \varphi = -\frac{1}{3} \Rightarrow \varphi = 109.5^\circ$$

Bemerkung 3.2.12. Das Tetraeder ist der einfachste Körper, der durch gleich große regelmäßige n -Ecke ($n = 3$) begrenzt wird. Solche Körper heißen reguläre Polyeder. Es gibt genau fünf verschiedene, die sogenannten Platonischen Körper:

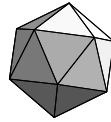
Tetraeder: 4 Dreiecke



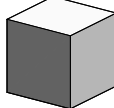
Oktaeder: 8 Dreiecke



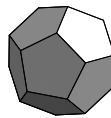
Ikosaeder: 20 Dreiecke



Würfel: 6 Quadrate



Dodekaeder: 12 Fünfecke

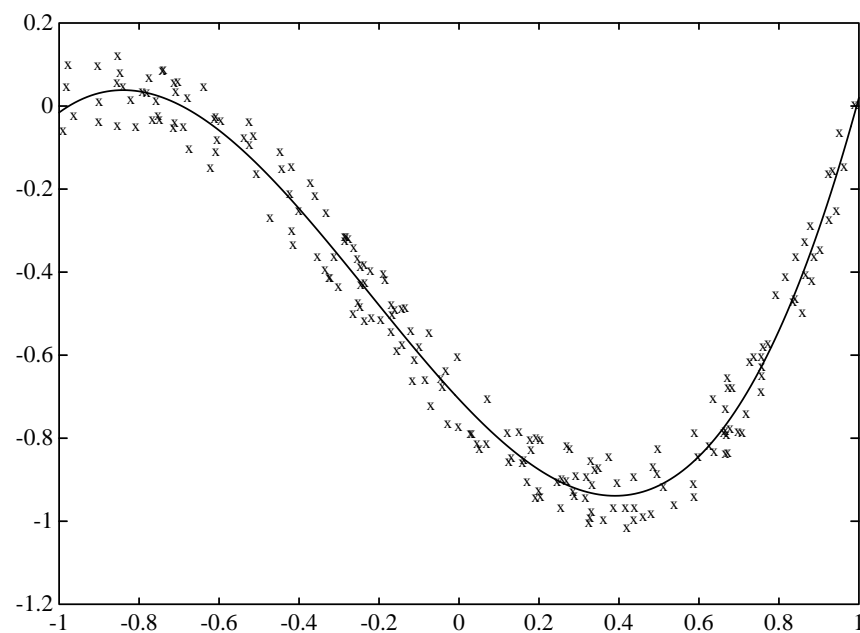


Diese regulären Polyeder spielen in der Chemie eine wichtige Rolle, da Kristalle und Moleküle möglichst regelmäßige Konfigurationen bilden.

3.3 Ausgleichsrechnung: Lineare Regression

Eine in allen Wissenschaften häufig auftretende Aufgabe ist die Approximation einer Folge von vielen, mit Fehlern behafteten Messdaten mittels einer „einfachen“ Funktion.

Beispiel 3.3.1: In der unten stehenden Zeichnung wurde ein Satz von Messdaten mit einem Polynom 3. Grades ausgeglichen.



Hier soll nur die Anpassung mittels linearer Polynome, also Geraden, betrachtet werden. Verwendet wird die sogenannte Methode der kleinsten Quadrate.

Gegeben sei eine Tabelle mit Stützstellen x_i und Funktionswerten f_i :

$$(x_i, f_i), \quad i = 1, \dots, m.$$

Gesucht sind die Koeffizienten a_0 und a_1 des linearen Ansatzes

$$g(x) := g(x; a_0, a_1) := a_0 + a_1 x, \quad (3.1)$$

so dass

$$F(a_0, a_1) := \sum_{i=1}^m (f_i - g(x_i))^2 \rightarrow \min_{a_0, a_1}. \quad (3.2)$$

Es ist also die Funktion

$$F(a_0, a_1) = (f_1 - a_0 - a_1 x_1)^2 + (f_2 - a_0 - a_1 x_2)^2 + \dots + (f_m - a_0 - a_1 x_m)^2$$

als Funktion von a_0 und a_1 zu minimieren. Dazu wird F nach a_0 und nach a_1 abgeleitet, und die Ableitungen werden Null gesetzt.

Das führt auf das folgende lineare Gleichungssystem mit zwei Gleichungen und den zwei Unbekannten a_0 und a_1 :

$$\begin{aligned} m a_0 + \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_1 &= \sum_{i=1}^m f_i \\ \left(\sum_{i=1}^m x_i \right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^m x_i^2 \right) a_1 &= \sum_{i=1}^m f_i x_i, \end{aligned}$$

zusammen

$$\begin{pmatrix} m & \sum x_i \\ \sum x_i & \sum x_i^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum f_i \\ \sum x_i f_i \end{pmatrix}$$

Dieses 2×2 -Gleichungssystem kann leicht mit der Cramer'schen Regel gelöst werden:

$$a_0 = \frac{\sum f_i \cdot \sum x_i^2 - \sum x_i \cdot \sum x_i f_i}{m \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

$$a_1 = \frac{m(\sum x_i f_i) - \sum x_i \sum f_i}{m \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2},$$

Es hat eine eindeutige Lösung, wenn $m \geq 2$ ist, und wenn es mindestens zwei Werte $x_i \neq x_j$ gibt.

Beispiel 3.3.2: Gegeben ist die folgende Wertetabelle

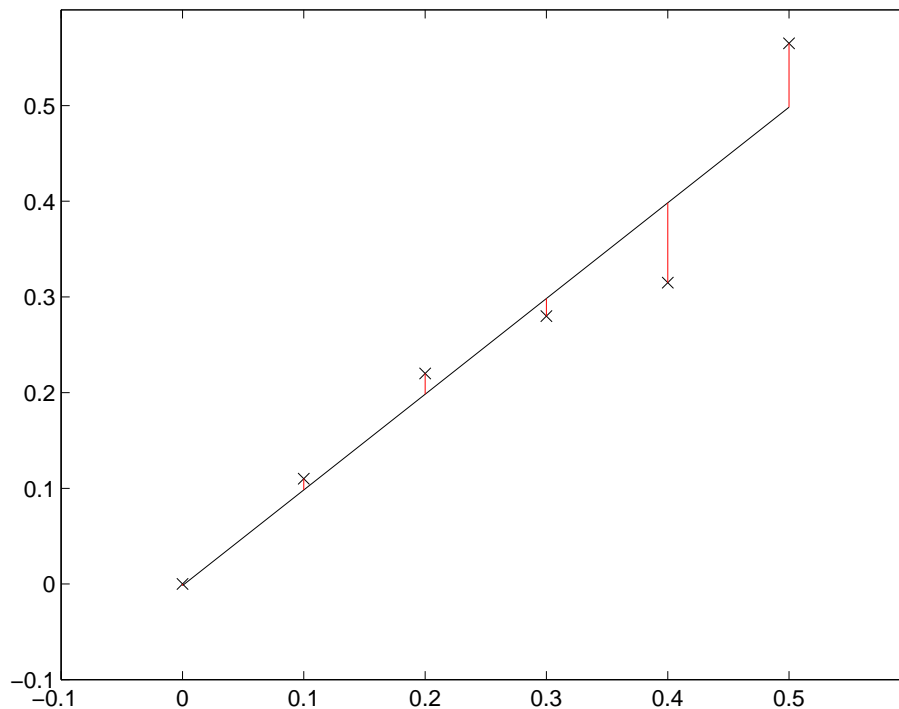
x_i	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5
f_i	0	0.11	0.22	0.28	0.315	0.565

Also sind

$$\begin{aligned} m = 6 & \quad \sum x_i = 1.5 & \quad \sum f_i &= 1.49 \\ & \quad \sum x_i^2 = 0.55 & \quad \sum x_i f_i &= 0.5475 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad a_0 = -0.001\bar{6} \quad a_1 = 1.00000$$

$$\text{Fehlerquadratsumme} = \sum (f_i - g(x_i, a_0, a_1))^2 = 0.012\bar{3}.$$



Wenn eine Funktionsform für die Messdaten bekannt ist, die nicht linear ist, gelingt es in vielen Fällen, die Form zu linearisieren wie in Bemerkung 3.1.22, d.h. in ein Polynom 1. Grades zu transformieren, dann die lineare Ausgleichung durchzuführen, um dann die Ergebnisse zurückzutransformieren.

Beispiel 3.3.3: Die Daten (x_i, y_i) seien Messdaten einer Funktion der Form

$$y = Ax^\alpha.$$

Dann gilt mit $\tilde{x} = \ln x$ und $\tilde{y} = \ln y$

$$\tilde{y} = \alpha \cdot \tilde{x} + \ln A,$$

Die aus (x_i, y_i) umgerechneten Daten $(\tilde{x}_i = \ln x_i, \tilde{y}_i = \ln y_i)$ werden linear ausgeglichen. Das ergibt die Koeffizienten α und $\ln A$ der obigen Geradengleichung. Mit $A = \exp(\ln A)$ ergibt sich die Darstellung in der gesuchten Funktionsform.

Entsprechend kann mit den anderen in Bemerkung 3.1.22 diskutierten Funktionsformen verfahren werden.

Beispiel: Gegeben sei die folgende Datentabelle

x	1.0	1.1	1.2	1.3	1.4	1.5	1.6	1.7	1.8	1.9	2.0
y	0.2788	0.5993	0.9297	1.2073	1.4683	1.4795	2.0252	2.4274	2.8426	3.2563	4.0878
f	0.5000	0.6655	0.8640	1.0985	1.3720	1.6875	2.0480	2.4565	2.9160	3.4295	4.0000

Sie wurde nach der Vorschrift

$$y_i = 0.5 x_i^3 + 0.5 \cdot (\text{Zufallszahl}([-0.5, 0.5]))$$

gebildet, die ungestörten Werte $f_i = 0.5 x_i^3$ stehen in der 3. Zeile.

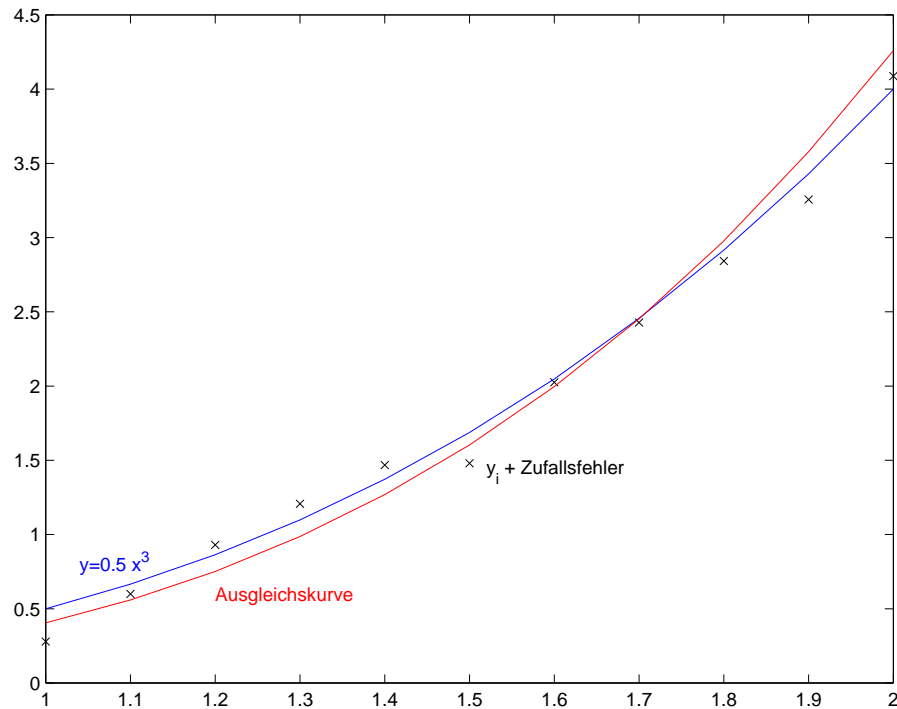
Mit diesen Werten werden die transformierten bzw. linearisierten Werte ($x'_i = \ln x_i$, $y'_i = \ln y_i$) gebildet und linear ausgeglichen. Dies ergibt die Koeffizienten

$$\ln A = a_0 = -0.9911 \quad \text{und} \quad \alpha = a_1 = 3.4902.$$

Also ist

$$A = \exp(-0.9911) = 0.3712.$$

Die Ergebnisse sind graphisch in der folgenden Zeichnung zusammengefasst. Man sieht, dass die großen Messfehler auch zu starken Abweichungen in den Koeffizienten A und α führen.



Kapitel 4

Folgen und Grenzwerte

4.1 Folgen

Definition 4.1.1. Eine (reelle) Folge (a_n) ist eine Funktion $f : \mathbb{N} \rightarrow \mathbb{R}$, die jedem $n \in \mathbb{N}$ die Zahl $a_n = f(n) \in \mathbb{R}$ zuordnet.

Bemerkungen 4.1.2: (a) Die Funktion f wird also durch die Folge der Funktionswerte a_1, a_2, a_3, \dots angegeben. Die a_n heißen Folgenglieder (mit Index n).

(b) Gelegentlich ist es sinnvoll, die Folgenglieder bei einem Index $n_0 \neq 1$ starten zu lassen. Z.B. ist $a_n = \frac{1}{n-1}$ nur für $n \geq 2$ erklärt. Man schreibt dann $(a_n)_{n \geq n_0}$.

Beispiele 4.1.3:

(a) (a_n) mit $a_n = 1/n$, also $1, \frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}, \dots$

(b) $(a_n)_{n \geq 0}$ mit $a_n = 2^n$, also $1, 2, 4, 8, 16, \dots$

Die a_n wachsen über alle Grenzen hinaus.

(c) (a_n) mit $a_n = (-1)^n$, also $-1, 1, -1, 1, -1, 1, \dots$

Die Folge „oszilliert“ zwischen den Werten -1 und 1 .

(d) (a_n) mit $a_n = \left(1 + \frac{1}{n}\right)^n$, also $2, 2.25, 2.37, \dots$

Diese Folge haben wir schon im Zusammenhang mit Wachstumsprozessen betrachtet. Die a_n nähern sich dem Wert $e = 2.71828\dots$

(e) $(a_n)_{n \geq 0}$ mit $a_0 = a_1 = 1$ und $a_{n+1} = a_{n-1} + a_n$ für $n \geq 1$, also $1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \dots$ (Fibonacci-Zahlen)

(f) (a_n) mit $a_1 = 1$ und $a_{n+1} = \frac{1}{2} \left(a_n + \frac{2}{a_n} \right)$ für $n \geq 1$, also $1, 1.5, 1.4166, 1.4142 \dots$

Die a_n^2 nähern sich dem Wert 2. Sie stellen das „Verfahren von Heron“ zur näherungsweisen Berechnung von $\sqrt{2}$ dar.

Bemerkungen 4.1.4:

- (i) Bei (e) und (f) handelt es sich um rekursiv definierte Folgen. Dabei wird der Wert einiger Folgenglieder explizit vorgegeben, sowie eine Vorschrift, wie der Reihe nach alle weiteren Folgenglieder berechnet werden.
- (ii) Da Folgen spezielle Funktionen sind, überträgt sich der Monotoniebegriff. Z.B. heißt (a_n) (streng) monoton wachsend, falls $a_n \leq a_{n+1}$ ($a_n < a_{n+1}$) für alle $n \in \mathbb{N}$ gilt. In den Beispielen: (a_n) streng fallend in (a), streng wachsend in (b), nicht monoton in (c), wachsend in (e); die Folgen aus (d) und (f) werden wir später auf Monotonie untersuchen.

4.2 Konvergenz von Folgen

In den Beispielen 4.1.3 (d) und (f) interessiert man sich für den „Grenzwert“, der durch diese Folgen bestimmt wird.

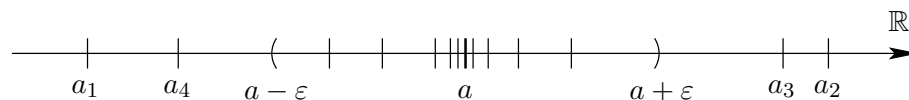
Definition 4.2.1. Eine Folge (a_n) hat den *Grenzwert* (Limes) a , falls für *alle* $\varepsilon > 0$ ein $n_\varepsilon \in \mathbb{N}$ existiert, so dass

$$|a_n - a| \leq \varepsilon \quad \text{für alle } n \geq n_\varepsilon$$

gilt. Man schreibt dann $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$ (oder auch: $a_n \rightarrow a$ für $n \rightarrow \infty$), und nennt (a_n) *konvergent* gegen a . Ist eine Folge (a_n) nicht konvergent, so heißt sie *divergent*.

Bemerkungen 4.2.2:

- (i) Ist (a_n) konvergent mit dem Grenzwert 0, so heißt (a_n) *Nullfolge*.
- (ii) Für die Konvergenz von (a_n) sind nur Folgenglieder mit großem Index wichtig. Insbesondere gilt dieselbe Definition für Folgen $(a_n)_{n \geq n_0}$.
- (iii) Man bezeichnet das offene Intervall $(a - \varepsilon, a + \varepsilon)$ auch als ε -Umgebung von a . Es gilt genau dann $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$, wenn in *jeder* ε -Umgebung von a alle Folgenglieder a_n bis auf endlich viele liegen.



Liegen in jeder ε -Umgebung von a unendlich viele der a_n (aber evtl. auch unendlich viele außerhalb), so bezeichnet man a als *Häufungspunkt* der Folge (a_n) . Ist (a_n) konvergent, so besitzt (a_n) also genau einen Häufungspunkt, und zwar den Grenzwert $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n$.

Die Folge (a_n) aus 4.1.3 (c) hat die beiden Häufungspunkte ± 1 , ist also divergent.

Beispiele 4.2.3:

- (a) (a_n) mit $a_n = \frac{1}{n}$. Vermutung: (a_n) ist eine Nullfolge.

Zu zeigen: $\forall \varepsilon > 0 \exists n_\varepsilon \in \mathbb{N} : n \geq n_\varepsilon \Rightarrow |a_n| \leq \varepsilon$.

Rückwärts anfangen: Wir wollen $\left|\frac{1}{n}\right| \leq \varepsilon$ erhalten.

$$\Leftrightarrow \frac{1}{n} \leq \varepsilon \quad \Leftrightarrow \quad n \geq \frac{1}{\varepsilon}.$$

Kandidat für n_ε ist also $\frac{1}{\varepsilon}$; dieser ist aber i.A. nicht ganzzahlig. Wähle also für n_ε die nächstgrößere ganze Zahl. Man schreibt $\lfloor x \rfloor$ für die nächstkleinere ganze Zahl von x , etwa $\lfloor 3.14 \rfloor = 3$, $\lfloor -7.1 \rfloor = -8$ (Gaußklammerfunktion).

Damit gilt für $n_\varepsilon = \left\lfloor \frac{1}{\varepsilon} \right\rfloor + 1$:

$$n \geq n_\varepsilon \Rightarrow n \geq \frac{1}{\varepsilon} \quad \Rightarrow \quad \left| \frac{1}{n} \right| \leq \varepsilon.$$

Beachte: n_ε hängt von ε ab!

Definition 4.2.4. Eine Folge (a_n) mit der Eigenschaft:

Es gibt eine *Schranke* $S > 0$ und ein $N \in \mathbb{N}$ mit

$$|a_n| \leq S \quad \text{für alle } n \geq N$$

heißt *beschränkt*.

Lemma 4.2.5. Aus (a_n) konvergent folgt (a_n) beschränkt.

Beweis. (a_n) konvergent, d.h. es gibt $a \in \mathbb{R}$ mit $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$.

Dann gilt insbesondere ($\varepsilon = 1$): $\exists N \in \mathbb{N} \quad |a_n - a| \leq 1 \quad \text{für alle } n \geq N$

$\Rightarrow \exists N \in \mathbb{N} : |a_n| \leq 1 + |a| \quad \text{für alle } n \geq N$.

Also gibt es eine Schranke $S := 1 + |a| > 0$ und ein $N \in \mathbb{N}$ mit

$$|a_n| \leq S \quad \text{für alle } n \geq N$$

□

- (b) (a_n) mit $a_n = 2^n$. Die nahe liegende Vermutung, dass (a_n) divergent ist, wird durch das eben bewiesene Lemma bestätigt, denn (a_n) ist unbeschränkt. Hier gilt sogar:

$$\forall S > 0 \exists N \in \mathbb{N} : n \geq N \Rightarrow a_n \geq S. \quad (*)$$

In diesem Fall heißt (a_n) *bestimmt divergent* gegen $+\infty$; man schreibt auch $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \infty$ und bezeichnet $+\infty$ als uneigentlichen Grenzwert von (a_n) .

Entsprechend mit $-\infty$ falls „ $a_n \leq -S$ “ in $(*)$.

Bemerkung 4.2.6. Es gilt folgender Zusammenhang zwischen Nullfolgen und bestimmt divergenten Folgen:

- (i) Ist (a_n) Nullfolge mit $a_n > 0$ ($a_n < 0$), so ist (b_n) mit $b_n = 1/a_n$ bestimmt divergent gegen $+\infty$ ($-\infty$).
- (ii) Ist (b_n) bestimmt divergent gegen $+\infty$ ($-\infty$), so gibt es ein $n_0 \in \mathbb{N}$ so daß $(a_n)_{n \geq n_0}$ mit $a_n = 1/b_n$ eine Nullfolge (mit $a_n \geq 0$ für $n \geq n_0$) ist.

Insbesondere ist also (a_n) mit $a_n = \frac{1}{n^p}$ für $p > 0$ stets eine Nullfolge!

4.3 Grenzwertsätze

Für komplizierte Folgen möchte man die Untersuchung auf Konvergenz und die Grenzwertbestimmung auf einzelne Anteile zurückführen. Dies gelingt in folgenden Situationen.

Satz 4.3.1. Die Folgen (a_n) und (b_n) seien konvergent mit dem Grenzwert a bzw. b . Dann gilt:

- (i) $\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n + b_n) = a + b$
- (ii) $\lim_{n \rightarrow \infty} (a_n b_n) = a b$
- (iii) $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{a_n}{b_n} \right) = \frac{a}{b}$, falls $b \neq 0$ und $b_n \neq 0$ für $n \geq n_0$
- (iv) Aus $a_n \leq b_n$ für $n \geq n_0$ folgt $a \leq b$

Beispiel 4.3.2: (a_n) mit $a_n = \frac{n^2 - n}{2n^2 + 1} = \frac{1 - 1/n}{2 + 1/n^2}$.

Wir wissen: $\frac{1}{n} \rightarrow 0$, $\frac{1}{n^2} \rightarrow 0$ für $n \rightarrow \infty$

$$\stackrel{\text{Satz 4.3.1}}{\Rightarrow} 1 - \frac{1}{n} \rightarrow 1, \quad 2 + \frac{1}{n^2} \rightarrow 2 \quad \text{für } n \rightarrow \infty$$

$$\stackrel{\text{Satz 4.3.1}}{\Rightarrow} a_n \rightarrow \frac{1}{2} \quad \text{für } n \rightarrow \infty.$$

Bemerkungen 4.3.3:

- (i) Teil (iv) von 4.3.1 wird oft mit $b_n = b \quad \forall n$ angewandt; man beachte auch: aus $a_n < b_n \forall n$ folgt *nicht* $a < b$!
- (ii) Eine Folge $(a_n - b_n)$ kann konvergieren, obwohl (a_n) und (b_n) divergent sind.

Beispiel 4.3.4: $a_n = \sqrt{n+1}$, $b_n = \sqrt{n}$; $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = \infty = \lim_{n \rightarrow \infty} b_n$.

$$c_n = a_n - b_n = \sqrt{n+1} - \sqrt{n} = \frac{n+1-n}{\sqrt{n+1} + \sqrt{n}} = \frac{1}{\sqrt{n+1} + \sqrt{n}} \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty)$$

Um Letzteres zu zeigen, verwendet man Teil (i) des folgenden Satzes.

Satz 4.3.5. Sei (a_n) eine Folge und (b_n) eine Nullfolge.

- (i) Gilt $|a_n| \leq |b_n|$ ab einem $n_0 \in \mathbb{N}$, so ist auch (a_n) Nullfolge.
- (ii) Ist (a_n) beschränkt, so ist $(a_n b_n)$ eine Nullfolge.

Beweis.

- (i) Sei $\varepsilon \geq 0$. Dann existiert $n_\varepsilon \in \mathbb{N}$, so dass $|b_n| \leq \varepsilon \Rightarrow |a_n| \leq |b_n| \leq \varepsilon$ für $n \geq n_\varepsilon$.
- (ii) $|a_n| \leq S \quad \forall n \geq n_\varepsilon \Rightarrow |a_n b_n| \leq S |b_n|$ und $S b_n \rightarrow 0$ nach Satz 4.3.1 (ii). □

Beispiel 4.3.6: (a_n) mit $a_n = q^n$ für ein $q \in \mathbb{R}$

- (a) $q = 0 : a_n = 0 \quad \forall n \Rightarrow \lim a_n = 0$
- (b) $q = 1 : a_n = 1 \quad \forall n \Rightarrow \lim a_n = 1$
- (c) $0 < q < 1 : a_n \rightarrow 0$, denn $|q^n| \leq \varepsilon \Leftrightarrow q^n \leq \varepsilon \Leftrightarrow n \ln q \leq \ln \varepsilon \Leftrightarrow n \geq \frac{\ln \varepsilon}{\ln q}$;
wähle also $n_\varepsilon = 1 + \left\lceil \frac{\ln \varepsilon}{\ln q} \right\rceil$.
- (d) $q > 1 : a_n \rightarrow \infty$, denn $q = 1 + x$ mit $x > 0 \Rightarrow q^n = (1 + x)^n \geq 1 + nx$ nach Bernoulli-ungleichung. Daraus folgt $q^n \nearrow \infty$ für $n \rightarrow \infty$.
- (e) $-1 < q < 0 : q^n = (-1)^n(-q)^n$; $(-1)^n$ ist beschränkt, $(-q)^n$ ist nach (c) Nullfolge
 $\Rightarrow q^n \rightarrow 0$ nach Satz 4.3.5 (ii).
- (f) $q = -1 : q^n = (-1)^n$ divergent; zwei Häufungspunkte ± 1 .
- (g) $q < -1 : |q^n| = |q|^n \rightarrow \infty$, d.h. divergent; (q^n) ist nicht bestimmt divergent, da die Vorzeichen wechseln.

Mit den bisherigen Sätzen lässt sich Konvergenz nur zeigen, wenn man den Grenzwert der Folge (bzw. einzelner Folgen bei zusammengesetzten Termen) kennt.

Für monotone Folgen gilt:

Satz 4.3.7. Sei (a_n) monoton und beschränkt. Dann ist (a_n) konvergent.

Bemerkungen 4.3.8:

- (i) Ist (a_n) monoton wachsend, so reicht es aus zu zeigen, daß (a_n) *nach oben beschränkt* ist, d.h. es gibt ein $M > 0$ mit $a_n \leq M \quad \forall n$; entsprechend für monoton fallendes (a_n) .
- (ii) Satz 4.3.7 gilt auch, wenn (a_n) erst ab einem bestimmten Index $n_0 \in \mathbb{N}$ monoton ist.

Beispiel 4.3.9: Wir betrachten die Folge $(a_n)_{n \geq 0}$ nach Beispiel 4.1.3 (f):

$$a_0 = 1, \quad a_{n+1} = \frac{1}{2} \left(a_n + \frac{2}{a_n} \right) \quad \text{für } n \geq 0.$$

Für diese Folge wollen wir zeigen:

- (1) Positivität,
- (2) Beschränktheit,
- (3) Monotonie,
- (4) dass ihr Grenzwert $a = \sqrt{2}$ ist.

zu (1): Aus $a_0 = 1$ und $a_{n+1} = \frac{1}{2} \left(a_n + \frac{2}{a_n} \right)$ folgt induktiv, dass alle $a_n > 0$.

zu (2): Wegen

$$\begin{aligned} a_{n+1}^2 - 2 &= \frac{1}{4} \left(a_n^2 + 2a_n \frac{2}{a_n} + \frac{4}{a_n^2} \right) - 2 = \frac{1}{4} \left(a_n^2 - 2a_n \frac{2}{a_n} + \frac{4}{a_n^2} \right) \\ &= \frac{1}{4} \left(a_n - \frac{2}{a_n} \right)^2 \geq 0 \quad \text{für } n \geq 0 \end{aligned}$$

gilt $a_n^2 \geq 2$ für $n \geq 1$. Also ist (a_n) nach unten beschränkt wegen (1).

zu (3): Wegen der Äquivalenzen

$$a_{n+1} \leq a_n \Leftrightarrow a_n + \frac{2}{a_n} \leq 2a_n \Leftrightarrow \frac{2}{a_n} \leq a_n \Leftrightarrow 2 \leq a_n^2$$

für $n \geq 1$ folgt aus $a_n^2 \geq 2$ nach (2) $a_{n+1} \leq a_n$. Also ist die Folge für $n \geq 1$ monoton fallend.

zu (4):

Satz 4.3.7 liefert: $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = a$ für ein $a \in \mathbb{R}$ und $a \geq 0$ nach Satz 4.3.1 (iv).

Welchen Wert hat a ? Aus der Rekursionsformel folgt:

$$2a_n a_{n+1} = a_n^2 + 2 \quad (\text{wir wissen noch nicht, ob } a \neq 0 \text{ gilt!})$$

Weiter klar: Die verschobene Folge (a_{n+1}) ist ebenfalls konvergent gegen a .

Also gilt nach Satz 4.3.1: $2a_n a_{n+1} \rightarrow 2a^2$ und $a_n^2 \rightarrow a^2$ für $n \rightarrow \infty$.

Damit gilt $a^2 = 2$ und $a \geq 0$, also $a = \sqrt{2}$.

Bemerkung 4.3.10. Es gibt ein allgemeingültiges Konvergenzkriterium, das keine Kenntnis des Grenzwertes voraussetzt: Eine reelle Folge (a_n) ist genau dann konvergent, wenn (a_n) eine *Cauchy-Folge* ist, d.h. wenn

$$\forall \varepsilon > 0 \exists n_\varepsilon \in \mathbb{N} : |a_n - a_m| \leq \varepsilon \text{ für } n, m \geq n_\varepsilon.$$

Dieses Konvergenzkriterium ist allerdings schwierig anzuwenden.

4.4 Reihen

Sei $(a_k)_{k \geq 0}$ eine reelle Folge. Wir betrachten nun unendliche Reihen $\sum_{k=0}^{\infty} a_k$. Dabei steht das Symbol $\sum_{k=0}^{\infty} a_k$ sowohl für die *Folge der Partialsummen* (s_n) mit $s_n = \sum_{k=0}^n a_k$, als auch für den Grenzwert, falls dieser existiert.

Definition 4.4.1. Die (unendliche) Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k$ heißt *konvergent*, falls die Folge (s_n) der Partialsummen konvergiert. Dann nennt man $s = \lim_{n \rightarrow \infty} s_n$ den Wert der Reihe und schreibt kurz $\sum_{k=0}^{\infty} a_k = s$; sonst heißt die Reihe *divergent*.

Bemerkung 4.4.2. Ganz entsprechend betrachtet man auch $\sum_{k=k_0}^{\infty} a_k$, etwa $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k}$; man schreibt auch kurz $\sum_{k \geq k_0} a_k$.

Satz 4.4.3 (Geometrische Reihe). Die *geometrische Reihe*

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = 1 + q + q^2 + q^3 + \dots \quad \text{mit } q \in \mathbb{R}$$

hat die Partialsummen

$$s_n = \begin{cases} \frac{1 - q^{n+1}}{1 - q} & \text{falls } \underline{q \neq 1} \\ n & \text{falls } \underline{q = 1} \end{cases}$$

Die Folge der Partialsummen und damit die geometrische Reihe ist genau dann konvergent, wenn $|q| < 1$ gilt. Dann ist

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q} \quad (|q| < 1).$$

Beweis. Es ist

$$\begin{aligned} s_n &= \sum_{k=0}^n q^k = 1 + q + q^2 + \dots + q^n \\ \text{und} \quad q s_n &= q + q^2 + \dots + q^n + q^{n+1} \\ \Rightarrow \quad s_n - q s_n &= 1 - q^{n+1} \quad \Rightarrow \quad s_n = \frac{1 - q^{n+1}}{1 - q} \quad \text{falls } \underline{q \neq 1}. \end{aligned}$$

Für $q = 1$ ist offenbar $s_n = n$, dann ist also $\sum_{n \geq 0} q^n$ divergent.

Sei also $q \neq 1$. Dann muss (q^{n+1}) konvergent sein und daraus folgt $|q| < 1$ (siehe Übung). Also ist die Bedingung $|q| < 1$ notwendig für die Konvergenz der geometrischen Reihe. Aus $|q| < 1$ folgt umgekehrt $q^{n+1} \rightarrow 0$ und damit die Konvergenz der s_n .

Fazit:
$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q} \quad (|q| < 1)$$

Also ist die geometrische Reihe genau dann konvergent, wenn $|q| < 1$. □

Eine *notwendige Bedingung* für die Konvergenz von $\sum_{k=0}^{\infty} a_k$ ist $\lim_{n \rightarrow \infty} a_n = 0!$

Denn: aus $s_n \rightarrow s$ folgt $s_{n-1} \rightarrow s$, also $a_n = s_n - s_{n-1} \rightarrow 0 \quad (n \rightarrow \infty)$.

Vorsicht: $a_n \rightarrow 0$ ist *nicht hinreichend* für die Konvergenz der Reihe!

Satz 4.4.4 (Harmonische Reihe). Die *harmonische Reihe*

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n}$$

ist bestimmt divergent.

$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} =$	1	
	$+ \frac{1}{2}$	$= 1/2$
	$+ \frac{1}{3} + \frac{1}{4}$	$\geq 2 \cdot 1/4 = 1/2$
	$+ \frac{1}{5} + \frac{1}{6} + \frac{1}{7} + \frac{1}{8}$	$\geq 4 \cdot 1/8 = 1/2$
	$+ \frac{1}{9} + \dots + \frac{1}{16}$	$\geq 8 \cdot 1/16 = 1/2$
	$+ \frac{1}{17} + \dots + \frac{1}{32}$	$\geq 16 \cdot 1/32 = 1/2$
	$+ \dots$	\vdots

Beweis. Es ist

Für $n = 2^m$ gilt deshalb $s_n \geq 1 + \frac{m}{2}$, d.h. s_n ist bestimmt divergent gegen $+\infty$. \square

Bemerkung 4.4.5. Berechnet man s_n mit dem Computer, so würde man auf Konvergenz schließen! (Im Rahmen der Maschinengenauigkeit gilt $\frac{1}{n} = 0$ ab einem großem n_0)

4.5 Konvergenzkriterien für Reihen

Aus den Grenzwertsätzen aus Abschnitt 4.3 folgt sofort

Satz 4.5.1.

$$(i) \sum_{n=0}^{\infty} (a_n + b_n) = a + b, \quad \text{falls} \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n = a, \quad \sum_{n=0}^{\infty} b_n = b.$$

$$(ii) \sum_{n=0}^{\infty} (\lambda a_n) = \lambda a, \quad \text{falls} \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n = a.$$

(iii) Ist $a_n \geq 0 \quad \forall n \geq 0$, so gilt:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n \text{ konvergent} \Leftrightarrow \text{Folge der Partialsummen ist beschränkt.}$$

Bemerkungen 4.5.2:

(i) In Teil (iii) ist (s_n) monoton wachsend.

(ii) Es gilt *nicht* $\sum_{n \geq 0} a_n b_n = \sum_{n \geq 0} a_n \sum_{n \geq 0} b_n$! Falls die Reihen rechts konvergieren, gilt

$$\sum_{n \geq 0} a_n \sum_{n \geq 0} b_n = \sum_{n \geq 0} \sum_{k=0}^n a_k b_{n-k} \quad (\text{Cauchy-Produkt}).$$

Beispiel 4.5.3: $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)}$. Es ist $\frac{1}{k(k+1)} = \frac{1}{k} - \frac{1}{k+1} \quad \forall k \in \mathbb{N}$, deshalb folgt

$$s_n = \sum_{k=1}^n \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1} \right) = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \sum_{k=2}^{n+1} \frac{1}{k} = 1 - \frac{1}{n+1} \leq 1.$$

Also ist die Reihe konvergent, denn $a_k \geq 0$ und (s_n) ist beschränkt.

Eine Reihe der Form $\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n a_n$ mit $a_n \geq 0 \quad (\forall n \geq 0)$ heißt *alternierend*.

Satz 4.5.4 (Leibniz-Kriterium). Die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_k$ ist konvergent, falls (a_n) eine *monoton fallende Nullfolge* ist.

In diesem Fall gilt

$$|s_n - s| \leq a_{n+1}, \quad \text{wobei} \quad s_n = \sum_{k=0}^n (-1)^k a_k \quad \text{und} \quad s = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k a_k \quad \text{ist.}$$

Beispiel 4.5.5: $\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{1}{n}$ ist konvergent (mit dem Wert $\ln 2$).

Das Beispiel zeigt auch, dass aus Konvergenz von $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$ *nicht* die Konvergenz der Reihe $\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|$ folgt. Diese stärkere Eigenschaft heißt *absolute Konvergenz*.

Satz 4.5.6 (Kriterien für absolute Konvergenz). Die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} a_k$ ist absolut konvergent, falls eine der folgenden Bedingungen erfüllt ist.

- (i) $|a_k| \leq b_k$ (für $k \geq k_0$) und $\sum_{k=0}^{\infty} b_k$ ist konvergent. (Majorantenkriterium)
- (ii) $\sqrt[k]{|a_k|} \leq q < 1$ für $k \geq k_0$ (Wurzelkriterium)
- (iii) $\left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| \leq q < 1$ für $k \geq k_0$ (Quotientenkriterium)

Bemerkung 4.5.7. Die Teile (ii) und (iii) folgen aus (i), indem man $b_k = Mq^k$ (geometrische Reihe) als Majorante verwendet. Anstelle von (ii) bzw. (iii) verwendet man praktisch oft die stärkere Bedingung

$$(ii)', \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \sqrt[k]{|a_k|} < 1,$$

$$(iii)', \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{k+1}}{a_k} \right| < 1.$$

Beispiele 4.5.8:

$$(a) \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} \quad \text{mit} \quad p \geq 2.$$

$$\text{Es gilt für } a_k = \frac{1}{n^p}: \quad |a_k| = \frac{1}{n^p} \leq \frac{1}{n^2} \leq 2 \frac{1}{n(n+1)} \quad \text{für } p \geq 2, n \geq 1.$$

Die Reihe $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n(n+1)}$ ist konvergent, also auch $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p}$ nach dem Majorantenkriterium.

$$\text{Für } p = 2 \text{ kann man den Wert berechnen:} \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

Man kann zeigen, dass die Reihe auch für $p > 1$ konvergiert. Die harmonische Reihe ($p = 1$) zeigt, dass diese Bedingung scharf ist.

$$(b) \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \quad \text{bzw.} \quad \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \quad \text{für } x \in \mathbb{R}$$

$$\text{Hier ist } a_n = \frac{x^n}{n!}, \text{ also } \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| = \left| \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} \cdot \frac{n!}{x^n} \right| = \left| \frac{x}{n+1} \right|$$

$$\Rightarrow \quad \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| \leq \frac{1}{2} < 1 \quad \text{für } n \geq 2|x| \quad (\text{bzw. } \lim_{n \rightarrow \infty} \left| \frac{a_{n+1}}{a_n} \right| = 0).$$

Die Reihe ist nach dem Quotientenkriterium für jedes $x \in \mathbb{R}$ konvergent.

Es gilt $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = e^x$; dies ist die übliche Definition der Exponentialfunktion!

Insbesondere ist $e = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}$. Diese Reihe ist ein Beispiel einer sogenannten *Potenzreihe*

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n \quad \text{bzw.} \quad \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n \quad \text{für einen Entwicklungspunkt } x_0.$$

Weitere wichtige Beispiele sind (Entwicklungspunkt hier immer $x_0 = 0$)

$$\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x} \quad \text{für } |x| < 1 \quad (\text{geometrische Reihe}),$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} = \sin x \quad \text{für } x \in \mathbb{R},$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} = \cos x \quad \text{für } x \in \mathbb{R}.$$

Diese unendlichen Reihen als Darstellung (bzw. Definition) spezieller Funktionen eignen sich insbesondere zur Berechnung von Näherungswerten für die entsprechenden Funktionswerte, z.B. für kleine Werte von x . Für die drei oben angegebenen Reihen liefert dies folgende Approximationen: Sei $0 < |x| \ll 1$. Dann ist:

Sei $0 < |x| \ll 1$. Dann ist

$$\frac{1}{1-x} \approx 1+x \quad \text{mit einem Fehler von } \approx x^2,$$

$$\sin(x) \approx x \quad \text{mit einem Fehler von } \approx x^3/6,$$

$$\cos(x) \approx 1 \quad \text{mit einem Fehler von } \approx x^2/2,$$

$$\cos(x) \approx 1 - x^2/2 \quad \text{mit einem Fehler von } \approx x^4/24.$$

4.6 Grenzwerte von Funktionen und Stetigkeit

Definition 4.6.1. Sei $D \subset \mathbb{R}$ und $f : D \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion.

- (i) f konvergiert gegen a für $x \rightarrow x_0$, falls gilt: Für jede Folge (x_n) mit $x_n \in D \setminus \{x_0\}$ und $x_n \rightarrow x_0$ ist $(f(x_n))$ konvergent gegen a . Man schreibt dann $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = a$.
- (ii) Sei $x \in D$. Dann heißt f stetig in x_0 , falls $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = f(x_0)$ gilt. f heißt stetig, falls f in jedem $x_0 \in D$ stetig ist.

Bemerkungen 4.6.2:

- (i) Wird die Bedingung in Definition 4.6.1(i) nur für Folgen $x_n \rightarrow x_0$ mit $x_n < x_0$ ($x_n > x_0$) verlangt, so spricht man vom linksseitigen (rechtsseitigen) Grenzwert und schreibt $\lim_{x \rightarrow x_0-} f(x)$ (bzw. $\lim_{x \rightarrow x_0+} f(x)$); man beachte auch, dass in (i) nicht $x_0 \in D$ verlangt ist!
- (ii) Gilt $f(x_n) \rightarrow \infty$ (bzw. $-\infty$) für jede Folge $x_n \rightarrow x_0$, so schreibt man auch $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = \infty$ (bzw. $-\infty$); entsprechendes gilt für einseitige Grenzwerte.
- (iii) Man betrachtet auch $x_0 = \pm\infty$, d.h. das Verhalten von f für $x \rightarrow \pm\infty$. Gilt etwa $f(x_n) \rightarrow a$ für jede Folge $x_n \rightarrow \infty$, so schreibt man $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = a$.

Als unmittelbare Folgerung aus den Grenzwertsätzen erhält man

Satz 4.6.3. Sei $D \subset \mathbb{R}$ und $f, g : D \rightarrow \mathbb{R}$.

- (i) Es sei $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x) = a$ und $\lim_{x \rightarrow x_0} g(x) = b$. Dann gilt

$$\lim_{x \rightarrow x_0} (f(x) + g(x)) = a + b, \quad \lim_{x \rightarrow x_0} (f(x)g(x)) = ab, \quad \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x)}{g(x)} = \frac{a}{b}, \quad \text{falls } b \neq 0.$$

- (ii) Es seien f und g stetig in x_0 .

Dann sind $f + g$, $f \cdot g$ und f/g (hier für $g(x_0) \neq 0$) stetig in x_0 .

- (iii) Ist g stetig in $x_0 \in D$ und $h : \tilde{D} \rightarrow \mathbb{R}$ stetig in $y_0 = g(x_0) \in \tilde{D}$, so ist die Verkettung $f = h \circ g$ (also $f(x) = h(g(x))$) stetig in x_0 .

Beispiele 4.6.4:

- (a) $f : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = \sqrt{x}$. Ist f stetig? Sei (x_n) eine Folge mit $x_n \geq 0$, $x_n \rightarrow x_0$. Für $x_0 = 0$: $\sqrt{x_n} \rightarrow 0$, denn $x_n \rightarrow 0$ heißt: $\forall \tilde{\varepsilon} > 0 \exists n_\varepsilon \in \mathbb{N} : |x_n| \leq \tilde{\varepsilon}$ für alle $n \geq n_\varepsilon$. Sei nun $\varepsilon > 0$ gegeben; wähle $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon^2$ und dazu das n_ε .

Dann gilt:

$$n \geq n_\varepsilon \Rightarrow |x_n| \leq \tilde{\varepsilon} = \varepsilon^2 \Rightarrow |\sqrt{x_n}| = \sqrt{x_n} \leq \sqrt{\tilde{\varepsilon}} = \varepsilon, \text{ also } (\sqrt{x_n}) \text{ Nullfolge.}$$

Für $x_0 > 0$:

$$|\sqrt{x_n} - \sqrt{x_0}| = \left| \frac{x_n - x_0}{\sqrt{x_n} + \sqrt{x_0}} \right| \leq \frac{|x_n - x_0|}{\sqrt{x_0}} \rightarrow 0, \text{ also } \sqrt{x_n} \rightarrow \sqrt{x_0}.$$

Fazit: \sqrt{x} ist stetig auf \mathbb{R}_0^+ .

- (b) $f(x) = \frac{x-1}{\sqrt{x}-1}$; maximaler Definitionsbereich: $D = \mathbb{R}_0^+ \setminus \{1\}$.

Nach Satz 4.6.3 ist f dort stetig (insbesondere: $\sqrt{x} - 1 \neq 0$ für $x \neq 1$).

$$\lim_{x \rightarrow 1} f(x) ? \quad \text{Für } x \neq 1 \text{ ist } f(x) = \frac{(\sqrt{x}-1)(\sqrt{x}+1)}{\sqrt{x}-1} = \sqrt{x} + 1.$$

Also stimmt f auf D mit der stetigen Funktion $g : \mathbb{R}_0^+ \rightarrow \mathbb{R}$, $g(x) = \sqrt{x} + 1$ überein!

Damit ist klar: $x_n \rightarrow 1 \Rightarrow g(x_n) = f(x_n) \rightarrow g(1) = 2$. Also $\lim_{x \rightarrow 1} f(x) = 2$.

Bemerkung: f ist also „stetig ergänzbar“ auf ganz \mathbb{R}_0^+ durch $f(1) := 2$.

- (c) $f(x) = 1/x^2$ für $x \neq 0$ hat $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) = \infty$.

- (d) $f(x) = 1/x$ für $x \neq 0$ hat $\lim_{x \rightarrow 0+} f(x) = \infty$ und $\lim_{x \rightarrow 0-} f(x) = -\infty$.

- (e) $f(x) = e^{\sin(x^2+1)}$ stetig, falls e^x , $\sin x$ etc. stetig sind. Nach Satz 4.6.3 sind alle Polynome stetig. Man kann dann auch zeigen, dass Potenzreihen im Bereich der absoluten Konvergenz stetig sind; insbesondere also e^x , $\sin x$ und $\cos x$ für $x \in \mathbb{R}$.

- (f) $f(x) = \frac{e^x}{x^n}$ mit $n \in \mathbb{N}$ für $x > 0$. Welches Verhalten hat $f(x)$ für $x \rightarrow \infty$?

$$\text{Es ist } e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!}, \text{ also } e^x \geq \frac{x^{n+1}}{(n+1)!} \text{ für } x > 0 \Rightarrow f(x) \geq \frac{x}{(n+1)!} \quad \forall x > 0.$$

Damit ist klar: $x_n \rightarrow \infty \Rightarrow f(x_n) \rightarrow \infty$, also $\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{e^x}{x^n} = \infty \quad \forall n \in \mathbb{N}$.

Fazit: „Die e -Funktion wächst stärker als jede Potenz von x “.

Für stetige Funktionen gilt

Satz 4.6.5. Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann hat f ein Maximum und ein Minimum in $[a, b]$, d.h. es gibt $x_1, x_2 \in [a, b]$ mit

$$\left(\min_{a \leq y \leq b} f(y) = \right) f(x_1) \leq f(x) \leq f(x_2) \quad \left(= \max_{a \leq y \leq b} f(y) \right).$$

Außerdem nimmt f jeden Zwischenwert $z \in [f(x_1), f(x_2)]$ an.

Anwendung von Satz 4.6.5 um Lösbarkeit von nichtlinearen Gleichungen zu zeigen:

Besitzt $x = \cos x$ eine Lösung $x \in [0, \pi]$?

$f : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $f(x) = x - \cos x$.

Dann $f(0) = -1$, $f(\pi) = \pi + 1$.

Also ist $\min_{0 \leq x \leq \pi} f(x) \leq 0 \leq \max_{0 \leq x \leq \pi} f(x)$. Nach Satz 4.6.5 existiert ein $x^* \in [0, \pi]$ mit $f(x^*) = 0$, also $x^* = \cos x^*$!

Bemerkung 4.6.6. $f : D_f \rightarrow W_f$ heißt *Lipschitz-stetig* (mit der Konstanten L), falls

$$|f(x) - f(y)| \leq L|x - y| \quad \forall x, y \in D_f,$$

mit einem $L \geq 0$ gilt. Diese Eigenschaft ist stärker als Stetigkeit.

Für $L < 1$ heißt f *Kontraktion*. Wichtig u.a. für Numerik: Löse die Gleichung $x = g(x)$; versuche $x = g(x)$ umzuformen in $x = f(x)$ mit Kontraktion f . Wähle dann $x_0 \in \mathbb{R}$ beliebig und definiere (x_n) durch $x_{n+1} = f(x_n)$ für $n \geq 0$. Die Folge (x_n) ist konvergent gegen ein x^* und $x^* = f(x^*)$.

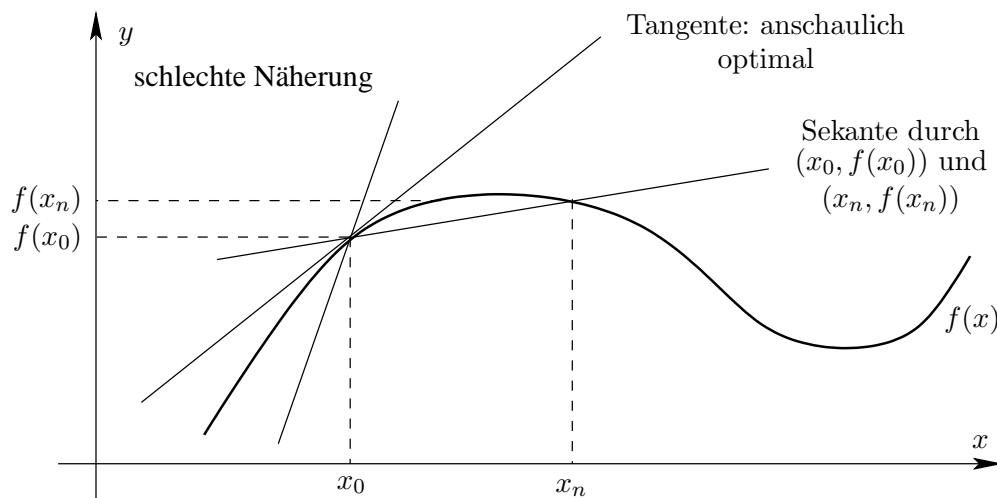
Fehlerabschätzung: $|x_n - x^*| \leq \frac{L^n}{1 - L} |x_1 - x_0|$.

Kapitel 5

Differentiation

5.1 Tangente und Ableitung

An eine ‘glatte’ Kurve kann in jedem Punkt eine Tangente gelegt werden. Ist die Kurve eine Funktion, so wird die Steigung einer solchen Tangente im Punkt x_0 die Ableitung der Funktion im Punkt x_0 genannt. In einer kleinen Umgebung des Punktes ist die Tangente eine gute Approximation der Funktion; Sekanten durch $(x_0, f(x_0))$ stellen schlechtere Näherungen dar.



Da die Tangente durch $(x_0, f(x_0))$ läuft, hat sie die Darstellung $y = l(x)$ mit

$$l(x) = f(x_0) + \alpha(x - x_0).$$

Dabei ist α die Tangenten-Steigung. Der Fehler bei dieser Näherung ist $|f(x) - l(x)|$ und die Näherung ist optimal, falls

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \left| \frac{f(x) - l(x)}{x - x_0} \right| = 0$$

gilt („der Fehler geht schneller gegen Null als $x - x_0$ “).

Die Tangenten-Steigung α kann wie folgt berechnet werden:

$$0 = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - l(x)}{x - x_0} = \lim_{x \rightarrow x_0} \left(\frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} - \alpha \right),$$

und damit

$$\alpha = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}.$$

Nach Definition des Grenzwertes bedeutet dies

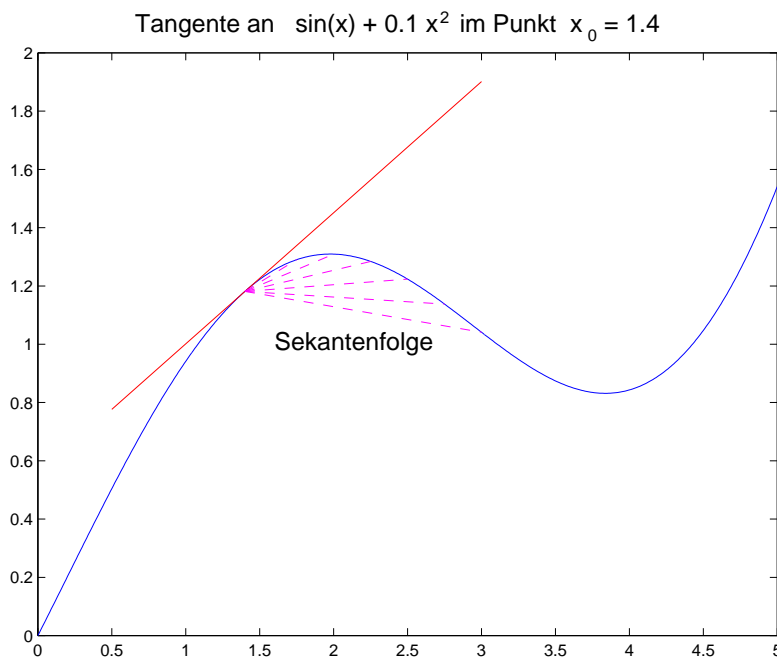
$$\alpha = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{f(x_n) - f(x_0)}{x_n - x_0}$$

für jede Folge (x_n) mit $x_n \rightarrow x_0$, d.h. für jede solche Folge ist α Grenzwert der Steigungen

$$\alpha_n := \frac{f(x_n) - f(x_0)}{x_n - x_0}.$$

Das sind die Steigungen der Sekanten durch den Punkt $(x_0, f(x_0))$ und durch die näher kommenden Nachbarnpunkte $(x_n, f(x_n))$.

In der folgenden Zeichnung ist die Folge der Steigungen der eingezeichneten Sekanten $\alpha_n = \{-0.0877, -0.0323, 0.0382, 0.121, 0.2131, 0.3108\}$, die Tangentensteigung ist $\alpha = 0.45$.



Definition 5.1.1. Die Funktion $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ sei auf einem Intervall I definiert. Dann heißt f *differenzierbar in $x_0 \in I$* , falls der Grenzwert

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0} \quad \left(= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \right)$$

existiert. Diesen Grenzwert bezeichnet man als *Ableitung von f in x_0* und schreibt dafür $f'(x)$ oder $\frac{df}{dx}(x_0)$. Die Funktion f heißt *differenzierbar*, wenn f in jedem $x_0 \in I$ differenzierbar ist.

Bemerkungen 5.1.2:

- (i) $\frac{df}{dx}$ wird Differentialquotient genannt, ist aber kein Quotient, sondern Grenzwert von Differenzenquotienten $\frac{\Delta f}{\Delta x}$ für $\Delta x \rightarrow 0$.
- (ii) Aufgrund der Vorüberlegungen ist es klar, dass genau dann eine eindeutige Tangente an $\text{gr}(f)$ im Punkt $(x_0, f(x_0))$ existiert, wenn f in x_0 differenzierbar ist. Die Tangentengleichung lautet dann $y = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$ und es gilt

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + r(x; x_0) \quad \text{mit} \quad \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{|r(x; x_0)|}{|x - x_0|} = 0.$$

Diese Beziehung ist äquivalent zur Differenzierbarkeit von f in x_0 . Als Folgerung erhält man sofort die Stetigkeit von f in x_0 , denn für (x_n) mit $x_n \rightarrow x_0$ folgt:

$$f(x_n) = f(x_0) + f'(x_0)(x_n - x_0) + (x_n - x_0) \frac{r(x_n; x_0)}{x_n - x_0} \rightarrow f(x_0).$$

Also ist Differenzierbarkeit stärker als Stetigkeit.

- (iii) Ist $x_0 \in I$ ein Randpunkt von I , so ist in Definition 5.1.1 der entsprechende einseitige Grenzwert zu verwenden. Man schreibt dann

$$f'_+(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0+} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad \text{bzw.} \quad f'_-(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0-} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

und nennt $f'_\pm(x_0)$ die *einseitigen Ableitungen* von f im Punkt x_0 .

- (iv) Ableitungen treten in Anwendungen bei der Betrachtung dynamischer Prozesse auf. Ist etwa $s(t)$ der Ort eines Objekts zum Zeitpunkt t , so ist $v(t) := s'(t)$ die Geschwindigkeit zur Zeit t . Für eine chemische Reaktion $A + B \rightarrow P$ mit Konzentrationsverläufen $c_A(t), c_B(t)$ und $c_P(t)$ ist $\nu := c'_P(t)$ die Reaktionsgeschwindigkeit. Ist diese Reaktion elementar, so gilt oft $\nu = k c_A c_B$ mit einer Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten $k > 0$. Dies führt auf $c'_P(t) = k \cdot c_A(t) \cdot c_B(t)$, eine sogenannte Differentialgleichung; dazu später mehr.

Beispiele 5.1.3:

- (a)
- $f(x) = x^2$
- und
- $x_0 \in \mathbb{R}$
- beliebig. Es ist

$$\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{(x_0 + h)^2 - x_0^2}{h} = \frac{(x_0^2 + 2x_0h + h^2 - x_0^2)}{h} = 2x_0 + h,$$

also

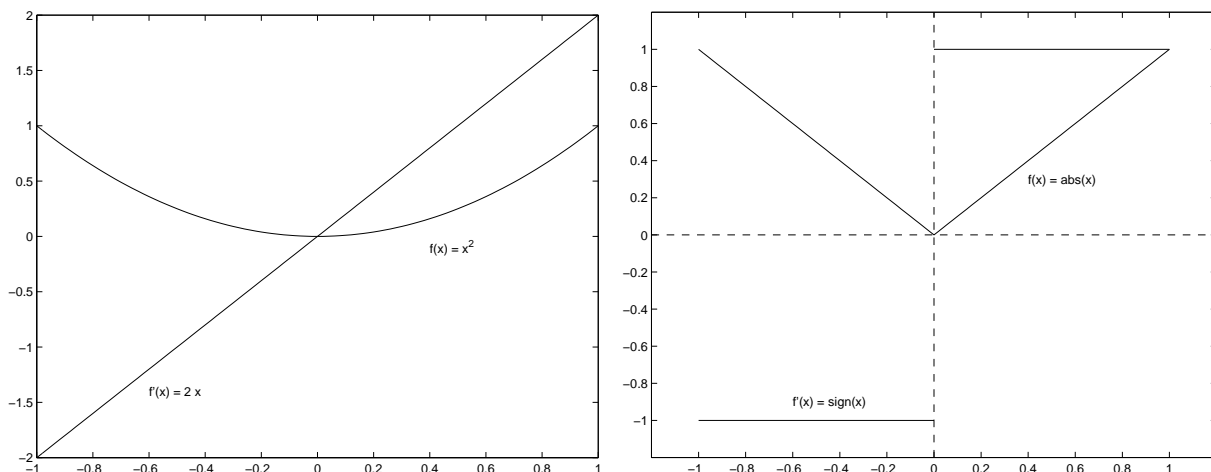
$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} (2x_0 + h) = 2x_0.$$

Damit ist f in jedem Punkt x_0 differenzierbar mit $f'(x_0) = 2x_0$.

- (b)
- $f(x) = |x|$
- und
- $x_0 = 0$
- . Es ist
- $\frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} = \frac{|h|}{h}$
- . Wir können jetzt zwei Fälle unterscheiden:

Fall 1: Folge h_n mit $h_n \geq 0$ oder $h_n \rightarrow 0+$ $\Rightarrow \frac{|h_n|}{h_n} = 1 \rightarrow 1$

Fall 2: Folge h_n mit $h_n \leq 0$ oder $h_n \rightarrow 0-$ $\Rightarrow \frac{|h_n|}{h_n} = \frac{-h_n}{h_n} = -1 \rightarrow -1$.

Zusammen heißt das: $f'(x_0)$ existiert nicht, aber es gibt eine rechtsseitige und eine linksseitige Ableitung. Dies ist auch klar am Graphen der Funktion abzulesen.**Ableitungen wichtiger Funktionen**

- (a)
- $f(x) = c$
- ist differenzierbar mit
- $f'(x) = 0$
- .

- (b)
- $f(x) = x^n$
- mit
- $n \in \mathbb{N}$
- ist differenzierbar mit
- $f'(x) = nx^{n-1}$
- .

Dies ist die Verallgemeinerung von Beispiel 5.1.3 (a) und kann mit Hilfe der binomischen Formel bewiesen werden.

- (c)
- $f(x) = x^r$
- für
- $x > 0$
- und
- $r \in \mathbb{R}$
- ist differenzierbar mit
- $f'(x) = rx^{r-1}$
- .

Beweis mittels $x^r = e^{r \ln x}$ und Kettenregel.

- (d)
- $f(x) = \sin x$
- für
- $x \in \mathbb{R}$
- ist differenzierbar mit
- $f'(x) = \cos x$
- .

Anschaulich: Die Sinus-Funktion steigt bei Null mit einer 45-Grad-Tangente an ($\cos(0) = 1$) und flacht allmählich so ab, wie die Werte der Cosinus-Funktion kleiner werden.

- (e)
- $f(x) = \cos x$
- ist für
- $x \in \mathbb{R}$
- differenzierbar mit
- $f'(x) = -\sin x$
- .

Anschaulich: Die Cosinus-Funktion beginnt bei $x = 0$ mit einer waagerechten Tangente ($\sin(0) = 0$) und fällt dann so, wie die Werte der Sinus-Funktion ansteigen.

- (f) $f(x) = e^x$ ist für $x \in \mathbb{R}$ differenzierbar mit $f'(x) = e^x$.

Erinnerung: Die Exponentialfunktion ist definiert als Potenzreihe

$$e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}.$$

Diese Reihe konvergiert für jedes $x \in \mathbb{R}$ absolut. Man kann allgemein zeigen, dass Potenzreihen im Innern des Konvergenzbereiches (hier: für jedes $x \in \mathbb{R}$) „gliedweise differenziert“ werden können, d.h.

$$(e^x)' = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \right)' = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{x^n}{n!} \right)'.$$

Wegen $(x^n)' = nx^{n-1}$ für $n \in \mathbb{N}$ (und $(x^0)' = 1' = 0$) folgt

$$(e^x)' = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} nx^{n-1} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} = e^x.$$

- (g) $f(x) = \ln x$ für $x > 0$ ist differenzierbar mit $f'(x) = \frac{1}{x}$. Beweis mittels Ableitungsformel für Umkehrfunktionen; später genau.

5.2 Differentiationsregeln

Satz 5.2.1. Seien f, g in x_0 differenzierbar. Dann sind auch $c_1 f + c_2 g$ (mit $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$), $f g$ und f/g (falls $g(x_0) \neq 0$) differenzierbar in x_0 und es gilt:

- (i) $(c_1 f + c_2 g)'(x_0) = c_1 f'(x_0) + c_2 g'(x_0),$
- (ii) $(f g)'(x_0) = f'(x_0)g(x_0) + g'(x_0)f(x_0),$
- (iii) $\left(\frac{f}{g} \right)'(x_0) = \frac{f'(x_0)g(x_0) - f(x_0)g'(x_0)}{g(x_0)^2}.$

Folgerungen 5.2.2:

- (a) Aus (i) und der Differenzierbarkeit von x^n für $n \in \mathbb{N}_0$ folgt, dass alle Polynome differenzierbar sind. Dann sind nach (iii) auch alle rationalen Funktionen (also $P(x)/Q(x)$ mit Polynomen P, Q) differenzierbar (auf ihrem maximalen Definitionsbereich, d.h. außerhalb der Nullstellen von Q).
- (b) Aus (iii) folgt $\left(\frac{1}{g} \right)'(x_0) = -\frac{g'(x_0)}{g(x_0)^2}$ für differenzierbares g mit $g(x_0) \neq 0$.

Beispiele 5.2.3:

- (a) trivial ist: $x' = 1$, also folgt

$$(x^2)' = (x \cdot x)' = 1 \cdot x + x \cdot 1 = 2x, \quad (x^3)' = (x \cdot x^2)' = 2x \cdot x + x^2 \cdot 1 = 3x^2, \text{ etc.}$$

Induktiv erhält man so einen Beweis für $(x^n)' = nx^{n-1}$.

- (b) $f(x) = e^x \sin x \Rightarrow f'(x) = e^x \sin x + e^x \cos x = e^x (\sin x + \cos x).$

$$(c) \quad f(x) = \frac{x^3 + 1}{x^2 - 1} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \{-1, 1\}.$$

$$\Rightarrow \quad f'(x) = \frac{(3x^2)(x^2 - 1) - (x^3 + 1)2x}{(x^2 - 1)^2} = \frac{3x^4 - 3x^2 - 2x^4 - 2x}{(x^2 - 1)^2} = \frac{x^4 - 3x^2 - 2x}{(x^2 - 1)^2}.$$

$$(d) \quad f(x) = \tan x = \frac{\sin x}{\cos x} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \left\{ \frac{\pi}{2} + k\pi : k \in \mathbb{Z} \right\}.$$

$$\Rightarrow \quad f'(x) = \frac{\cos x \cos x - \sin x(-\sin x)}{\cos^2 x} = \frac{1}{\cos^2 x}.$$

$$(e) \quad f(x) = x \ln x - x \quad \Rightarrow \quad f'(x) = (x \ln x)' - 1 = 1 \cdot \ln x + x \cdot \frac{1}{x} - 1 = \ln x.$$

Satz 5.2.4 (Kettenregel). Es seien f im Punkt x_0 und g im Punkt $y_0 = f(x_0)$ differenzierbar. Dann ist die verkettete Funktion $h(x) := g(f(x))$ im Punkt x_0 differenzierbar mit

$$\boxed{h'(x_0) = g'(f(x_0)) f'(x_0)}.$$

Bemerkung 5.2.5. Für die verkettete Funktion h schreibt man auch $g \circ f$, d.h.

$$(g \circ f)(x) := g(f(x)).$$

Man spricht auch von hintereinander geschalteten Funktionen. Damit schreibt sich die Kettenregel als

$$\boxed{(g \circ f)'(x_0) = g'(f(x_0)) f'(x_0)}.$$

Dabei heißt $g'(f(x_0))$ die *äußere Ableitung* und der Faktor $f'(x_0)$ *innere Ableitung*.

Beispiele 5.2.6:

- (a) Es ist $\cos x = \sin\left(x + \frac{\pi}{2}\right)$, also $\cos x = g(f(x))$ mit $g(y) = \sin y$ und $f(x) = x + \frac{\pi}{2}$. Nach der Kettenregel folgt

$$(\cos x)' = g'(f(x)) f'(x) = \cos\left(x + \frac{\pi}{2}\right) \cdot 1 = \cos\left(x + \frac{\pi}{2}\right) = -\sin x.$$

- (b) Es ist $x^r = e^{r \ln x}$, also $x^r = g(f(x))$ mit $g(y) = e^y$ und $f(x) = r \ln x$.

Nach der Kettenregel folgt

$$(x^r)' = g'(f(x)) f'(x) = e^{f(x)} r \frac{1}{x} = e^{r \ln x} \frac{r}{x} = x^r \frac{r}{x} = r x^{r-1}.$$

- (c) Sei $h(x) = \sin \sqrt{x^2 + 1}$. Berechne $h'(x)$.

Es ist $h(x) = g(f(x))$ mit $g(y) = \sin y$ und $f(x) = \sqrt{x^2 + 1}$.

$$\Rightarrow h'(x) = \cos(f(x)) f'(x).$$

Wie lautet $f'(x)$? Es ist $f(x)$ wiederum eine verkettete Funktion: $f(x) = u(v(x))$ mit $u(y) = \sqrt{y}$ und $v(x) = x^2 + 1$. Also gilt $\left(\text{mit } (\sqrt{y})' = \frac{1}{2\sqrt{y}}\right)$

$$f'(x) = \frac{1}{2\sqrt{v(x)}} v'(x) = \frac{2x}{2\sqrt{x^2+1}} = \frac{x}{\sqrt{x^2+1}}$$

Fazit: $h'(x) = \frac{x}{\sqrt{x^2+1}} \cos \sqrt{x^2+1}$.

Ableitung von Umkehrfunktionen

Den Definitions- und Wertebereich einer Funktion f bezeichnen wir wieder mit D_f bzw. W_f . Unter einer Umgebung U um einen Punkt $x_0 \in \mathbb{R}$ versteht man ein Intervall der Form $(x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon)$ für ein $\epsilon > 0$.

Satz 5.2.7. Sei $f : D_f \rightarrow W_f$ ($D_f, W_f \subset \mathbb{R}$) eine umkehrbare Funktion, die in einer Umgebung U um den Punkt $x_0 \in D_f$ differenzierbar ist. Es gelte $f'(x_0) \neq 0$. Dann ist f^{-1} im Punkt $y_0 = f(x_0)$ differenzierbar und

$$\boxed{(f^{-1})'(y_0) = \frac{1}{f'(f^{-1}(y_0))} \quad \left(= \frac{1}{f'(x_0)}\right)}.$$

Beweisidee: Sei $g = f^{-1}$ und $h(x) = x$. Dann gilt $g(f(x)) = h(x)$ für alle $x \in D_f$. Falls g in y_0 differenzierbar ist, liefert die Kettenregel:

$$(g \circ f)'(x_0) = g'(f(x_0)) f'(x_0) = h'(x_0) = 1,$$

also mit $y_0 = f(x_0)$:

$$(f^{-1})'(y_0) = \frac{1}{f'(x_0)} = \frac{1}{f'(f^{-1}(y_0))}.$$

Beispiele 5.2.8:

- (a) $f(x) = e^x$ mit $D_f = \mathbb{R}$, $W_f = (0, \infty)$. Hier ist $f^{-1}(y) = \ln y$ für $y > 0$. Es ist $f'(x) = e^x$ und damit nach Satz 5.2.7

$$(\ln y)' = (f^{-1})'(y) = \frac{1}{f'(\ln y)} = \frac{1}{e^{\ln y}} = \frac{1}{y} \quad \text{für } y > 0.$$

- (b) $f(x) = \sin x$ mit $D_f = (-\pi/2, \pi/2)$, $W_f = (-1, 1)$. Hier ist $f^{-1}(y) = \arcsin y$ für $y \in (-1, 1)$. Es ist $f'(x) = \cos x \neq 0$ in D_f , also

$$(\arcsin y)' = \frac{1}{f'(\arcsin y)} = \frac{1}{\cos(\arcsin y)} = \frac{1}{\sqrt{1 - \sin^2(\arcsin y)}} = \frac{1}{\sqrt{1 - y^2}}.$$

- (c) $f(x) = x + e^x$ mit $D_f = \mathbb{R}$, $W_f = \mathbb{R}$. Die Funktion f ist streng monoton wachsend, also injektiv. Damit ist f auf dem Wertebereich W_f invertierbar. Sei f^{-1} die Umkehrfunktion. Welchen Wert hat $(f^{-1})'(1)$?

Problem: Für f^{-1} kann keine geschlossene Formel angegeben werden.

Ausweg: Um Satz 5.2.7 anzuwenden, brauchen wir nur den Punkt $x_0 \in D_f$ mit $f(x_0) = 1$ ($=: y_0$) zu finden! In diesem Beispiel gilt offensichtlich $x_0 = 0$. Also folgt

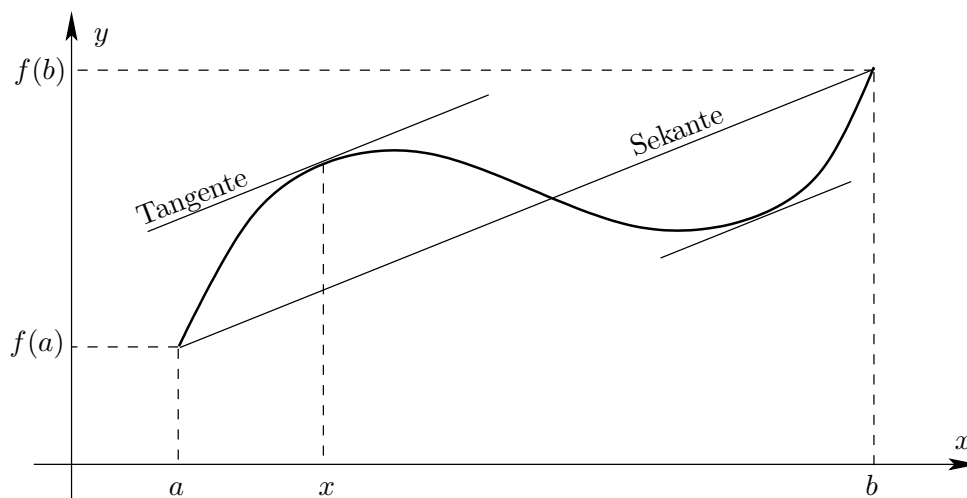
$$(f^{-1})'(y_0) = \frac{1}{f'(x_0)} = \frac{1}{1 + e^{x_0}} = \frac{1}{2}.$$

5.3 Mittelwertsatz (der Differentialrechnung)

Satz 5.3.1. Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und in (a, b) differenzierbar. Dann gilt

- (i) Ist $f(a) = f(b)$, so existiert ein $x \in (a, b)$ mit $f'(x) = 0$. (*Satz von Rolle*)
- (ii) Es gibt ein $x \in (a, b)$ mit $f'(x) = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$. (*Mittelwertsatz, kurz MWS*)

Bemerkung 5.3.2. Der Satz von Rolle ist ein Spezialfall des Mittelwertsatzes. Anschaulich sagt der Mittelwertsatz, dass es im Intervall (a, b) mindestens eine Stelle gibt an der die Tangente parallel zur Sekante (durch die Endpunkte) verläuft:



Man sieht an der Skizze, dass die Stelle x i.a. nicht eindeutig bestimmt ist.

Der Mittelwertsatz wird oft in einer der folgenden Formulierungen verwendet:

- $f(y) = f(x) + f'(\xi)(y - x)$ für eine Zwischenstelle ξ , d.h. $x < \xi < y$ bzw. $y < \xi < x$.
Mit $h := y - x$ wird daraus
- $f(x + h) = f(x) + f'(x + \theta h)h$ für ein $\theta \in (0, 1)$.

Korollar 5.3.3: Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig und in (a, b) differenzierbar. Dann gilt

- (i) $f'(x) = 0$ für alle $x \in (a, b) \Rightarrow f$ ist konstant in $[a, b]$.
- (ii) f ist monoton wachsend (fallend) in $[a, b] \Leftrightarrow f'(x) \geq 0$ (≤ 0) in (a, b) .
- (iii) $f'(x) > 0$ (< 0) in $(a, b) \Rightarrow f$ ist streng monoton wachsend (fallend).

Exemplarisch:

Beweis von (iii). Zu zeigen ist:

$$x, y \in [a, b] \text{ mit } x < y \Rightarrow f(x) < f(y).$$

Nach dem Mittelwertsatz gilt

$$f(y) = f(x) + f'(\xi)(y - x) \text{ mit } x < \xi < y.$$

Nach Voraussetzung ist $f'(\xi) > 0$. Wegen $y - x > 0$ folgt $f'(\xi)(y - x) > 0$, und damit

$$f(y) = f(x) + f'(\xi)(y - x) > f(x).$$

□

Beispiele 5.3.4:

- (a) Zeige: $\cos x \geq 1 - \frac{1}{2}x^2$ für alle $x \in \mathbb{R}$.

Beweis 1:

Die Aussage ist trivial für $|x| > 2$. Sei also $|x| \leq 2$. Wir betrachten die Potenzreihe für die Cosinus-Funktion (siehe Abschnitt 4.5, Seite 56):

$$\cos(x) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} - \frac{x^6}{720} \pm \dots$$

Dies ist eine alternierende Reihe, deren Glieder für alle $x \leq 2$ eine monoton fallende Nullfolge bilden. Also ist

$$\cos(x) - 1 + \frac{x^2}{2} \geq \frac{x^4}{24} \geq 0.$$

Beweis 2:

Setze $f(x) := \cos x - 1 + \frac{1}{2}x^2$; zu zeigen ist dann $f(x) \geq 0$ für $x \in \mathbb{R}$. Da f eine gerade Funktion ist, reicht es, $f(x) \geq 0$ für $x \geq 0$ zu zeigen. Es gilt $f(0) = \cos(0) - 1 = 0$ und $f'(x) = -\sin x + x \geq 0$ für $x \geq 0$. Nach Korollar 5.3.3 ist dann f monoton wachsend auf \mathbb{R}_+ . Also folgt $f(x) \geq f(0) = 0$ für $x \geq 0$.

- (b) Welche differenzierbaren Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ genügen der Beziehung

$$(*) \quad f'(x) = af(x) \quad \text{mit einer Konstanten } a \in \mathbb{R}?$$

Wir wissen $(e^x)' = e^x$ und nach der Kettenregel folgt $(e^{ax})' = ae^{ax}$, d.h. die Funktionen $f(x) = ce^{ax}$ (mit beliebiger Konstante $c \in \mathbb{R}$) erfüllen die Gleichung (*). Umgekehrt gilt die folgende

Behauptung: Die einzigen differenzierbaren Funktionen $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die (*) erfüllen sind durch $f(x) = c e^{ax}$ mit einer Konstante $c \in \mathbb{R}$ gegeben.

Beweis. Gegeben sei eine Funktion $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, die (*) erfüllt. Setze $g(x) := f(x)e^{-ax}$. Dann gilt

$$g'(x) = f'(x)e^{-ax} + f(x)e^{-ax} \cdot (-a) = e^{-ax}(f'(x) - af(x)) = 0 \quad \text{auf } \mathbb{R}.$$

Nach Korollar 5.3.3 folgt: g ist konstant, also $g(x) = c$ für ein $c \in \mathbb{R}$.

Also ist $f(x)e^{-ax} = c$ und damit $f(x) = c e^{ax}$. □

Fazit: Sei $a \in \mathbb{R}$ gegeben, und $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ differenzierbar. Dann gilt

$$\boxed{f'(x) = af(x) \text{ auf } \mathbb{R} \quad \Leftrightarrow \quad f(x) = c e^{ax} \text{ mit } c \in \mathbb{R} .}$$

Eine weitere Folgerung aus dem Mittelwertsatz ist

Satz 5.3.5 (Regel von de L'Hôpital). Seien f und g in (a, b) differenzierbar und $g'(x) \neq 0$ für $x \in (a, b)$. Gilt

$$\lim_{x \rightarrow a+} f(x) = 0, \quad \lim_{x \rightarrow a+} g(x) = 0, \quad \text{und} \quad \lim_{x \rightarrow a+} \frac{f'(x)}{g'(x)} \quad \text{existiert,}$$

so folgt

$$\boxed{\lim_{x \rightarrow a+} \frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x \rightarrow a+} \frac{f'(x)}{g'(x)}}$$

Bemerkung 5.3.6. An Stellen $x_0 \in (a, b)$ gilt der entsprechende Satz mit den üblichen zweiseitigen Grenzwerten, im Punkt b entsprechend mit linksseitigen Grenzwerten. Der Satz bleibt auch richtig, wenn die Voraussetzung

$$\lim_{x \rightarrow a+} f(x) = \lim_{x \rightarrow a+} g(x) = 0$$

durch

$$\lim_{x \rightarrow a+} f(x) = \lim_{x \rightarrow a+} g(x) = \infty$$

ersetzt wird.

Beispiele 5.3.7:

(a) $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = ?$ Es ist $\lim_{x \rightarrow 0} \sin x = 0 = \lim_{x \rightarrow 0} x$.

Prüfe, ob $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x}$ existiert: $\frac{(\sin x)'}{x'} = \frac{(\cos x)}{1} \rightarrow 1$ für $x \rightarrow 0$

Also gilt $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1$ nach Satz 5.3.5.

(b) $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos x}{x^2} = ?$ Existiert $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{(1 - \cos x)'}{(x^2)'} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{2x} ?$

Nach (a) gilt $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{2x} = \frac{1}{2}$, und daraus folgt $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1 - \cos x}{x^2} = \frac{1}{2}$.

Im Beispiel (b) haben wir eigentlich zweite Ableitungen verwendet!

Definition 5.3.8. Sei f in einer Umgebung U um den Punkt x_0 differenzierbar. Ist die Ableitung f' in dem Punkt x_0 differenzierbar, d.h. existiert

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{f'(x_0 + h) - f'(x_0)}{h} =: f''(x_0),$$

so heißt f *zweimal differenzierbar* in x_0 und $f''(x_0)$ die zweite Ableitung von f in x_0 . Analog definiert man höhere Ableitungen $f'''(x_0)$, $f^{(4)}(x_0)$, \dots , $f^{(n)}(x_0)$.

5.4 Extrema und Wendepunkte

Definition 5.4.1. Sei $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ und $x_0 \in (a, b)$. Dann hat f in x_0 ein *lokales Maximum* (*Minimum*), falls eine Umgebung U um x_0 existiert, so dass

$$f(x) \leq f(x_0) \quad (\text{bzw.} \quad f(x) \geq f(x_0)) \quad \text{für alle} \quad x \in U$$

gilt. Sind die Ungleichungen für $x \neq x_0$ strikt, so spricht man von einem *strengen lokalen Maximum* (*Minimum*). Unter dem Begriff *Extremum* versteht man ein Minimum oder ein Maximum.

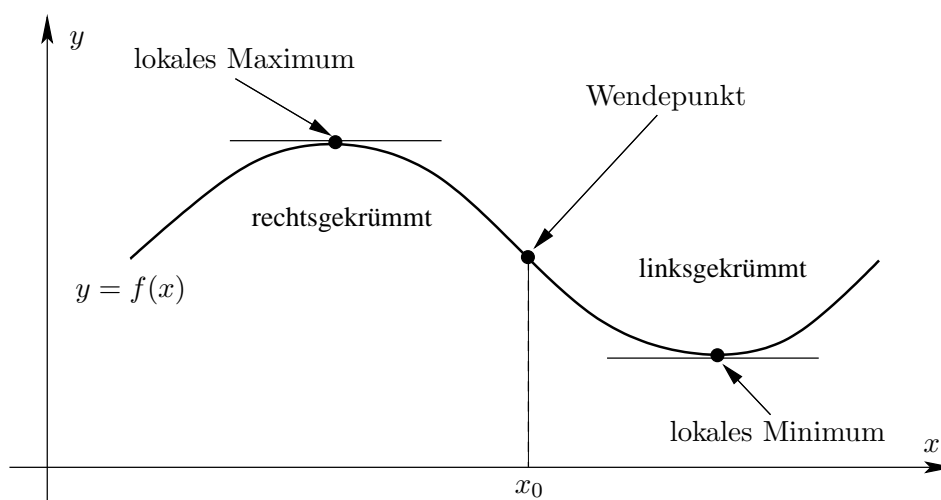
Um Extremstellen einer differenzierbaren Funktion zu finden, verwendet man

Satz 5.4.2. Sei $f : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$ in einer Umgebung des Punktes $x_0 \in (a, b)$ differenzierbar.

- (i) Hat f in x_0 in lokales Extremum, so gilt $f'(x_0) = 0$.
- (ii) Gilt $f'(x_0) = 0$ und $f''(x_0) \neq 0$, so besitzt f im Punkt x_0 ein strenges lokales Extremum und zwar ein Maximum falls $f''(x_0) < 0$ bzw. ein Minimum falls $f''(x_0) > 0$.

Bemerkungen 5.4.3:

- (i) $f'(x_0) = 0$ ist *notwendig* für ein Extremum in x_0 , aber allein *nicht hinreichend*, d.h. x_0 muss dann keine Extremstelle sein! Z.B. hat $f(x) = x^3$ kein Extremum in $x_0 = 0$, obwohl $f'(0) = 0$ gilt.



- (ii) Der Zusammenhang zwischen dem Vorzeichen von $f''(x_0)$ und der Art des Extremums in Teil(b) erklärt sich durch die geometrische Bedeutung der zweiten Ableitung: Ist $f''(x_0) > 0$ (bzw. < 0), so ist der Graph von f an dieser Stelle linksgekrümmt (bzw. rechtsgekrümmt). Ein Punkt in dem die Krümmung wechselt heißt *Wendepunkt*.

Notwendig für einen Wendepunkt von f in x_0 ist $f''(x_0) = 0$, hinreichend ist $f''(x_0) = 0$ und $f'''(x_0) \neq 0$.

Beispiel 5.4.4: Extrema, Wendepunkte von $f(x) = xe^{-x}$?

Berechne f' : $f'(x) = e^{-x} + xe^{-x} \cdot (-1) = e^{-x}(1 - x)$

Also $f'(x_0) = 0 \Leftrightarrow x_0 = 1$; d.h. $x_0 = 1$ ist einziger Kandidat für eine Extremstelle.

Berechne f'' : $f''(x) = -e^{-x}(1 - x) + e^{-x} \cdot (-1) = e^{-x}(x - 2)$

$\Rightarrow f''(x_0) = e^{-1}(1 - 2) = -\frac{1}{e} < 0 \Rightarrow f$ hat strenges lokales Maximum in $x_0 = 1$.

Wendepunkte: $f''(x_1) = 0 \Leftrightarrow x_1 = 2$; einziger Kandidat für einen Wendepunkt.

Berechne f''' : $f'''(x) = -e^{-x}(x - 2) + e^{-x} \cdot 1 = e^{-x}(3 - x)$

$\Rightarrow f'''(x_1) = e^{-2}(3 - 2) = \frac{1}{e^2} > 0 \Rightarrow f$ hat Wendepunkt in $x_1 = 2$.

Mehr dazu in der Übung unter dem Stichwort *Kurvendiskussion*.

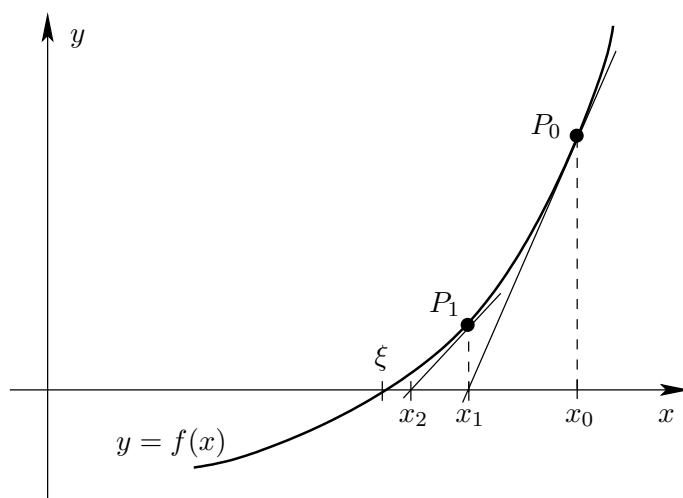
5.5 Das Newton'sche Iterationsverfahren

Die Lösung von Gleichungen der Form $f(x) = 0$ (also die Bestimmung der Nullstellen einer Funktion) ist oft *exakt* (d.h. mittels einer Formel) *nicht möglich*. Das Newton-Verfahren ist ein numerisches Verfahren um solche Gleichungen *näherungsweise* zu lösen.

Geometrische Idee: Ist x_0 eine Stelle „in der Nähe“ der gesuchten Nullstelle ξ der Funktion f , so ersetze man f durch die Tangente an f im Punkt x_0 . Der Schnittpunkt der Tangente mit der x -Achse ist dann eine Näherung für ξ .

Diese Idee wird wiederholt verwendet:

- Tangente im Punkt $P_0 = (x_0, f(x_0))$ liefert Schnittpunkt x_1
- Tangente im Punkt $P_1 = (x_1, f(x_1))$ liefert Schnittpunkt x_2
- Tangente im Punkt $P_2 = (x_2, f(x_2))$ liefert Schnittpunkt x_3



Wie berechnet sich x_{n+1} aus x_n ? Die Tangentengleichung im Punkt $(x_n, f(x_n))$ lautet

$$y = f(x_n) + f'(x_n)(x - x_n),$$

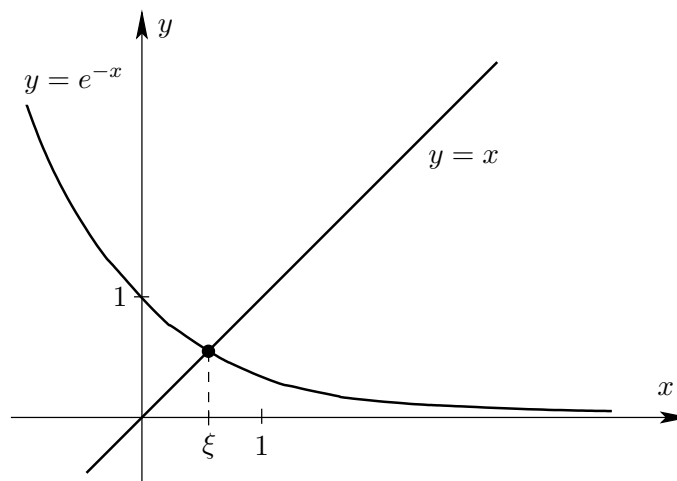
also ist $x = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$ der Schnittpunkt mit der x -Achse ($y = 0$). Damit ist

$$\boxed{x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (n = 0, 1, 2, \dots)} \quad (5.1)$$

die Iterationsvorschrift des Newton-Verfahrens.

Beispiel 5.5.1: Löse die Gleichung $x = e^{-x}$.

(a) Ist diese Gleichung überhaupt lösbar?



Nach der Skizze sollte eine eindeutige Lösung $x > 0$ existieren!

Mathematisch exakt: $x = e^{-x} \Leftrightarrow 0 = f(x) := x - e^{-x}$.

Es ist $f(0) = -1 < 0$ und $f(1) = 1 - 1/e > 0$, also hat f einen Vorzeichenwechsel in $[0, 1]$. Außerdem ist $f'(x) = 1 + e^{-x} > 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$, also nach Korollar 5.1: f ist streng monoton wachsend, daher hat f nur diese eine Nullstelle (d.h. $f(x) = 0$ ist eindeutig lösbar).

(b) Näherungsweise Berechnung der Nullstelle von f . Für $f(x) = x - e^{-x}$ lautet das Iterationsverfahren (5.1):

$$x_{n+1} = x_n - \frac{x_n - e^{-x_n}}{1 + e^{-x_n}} \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Nach 1.) ist z.B. $x_0 = 0$ ein sinnvoller Startwert. Ausrechnen der Iterationsvorschrift liefert die Werte:

$$\begin{aligned} x_1 &= 0.5, & x_2 &= 0.5663\dots, & x_3 &= 0.5671421\dots, \\ x_4 &= 0.5671433\dots, & x_5 &= 0.5671433\dots \end{aligned}$$

Der folgende Satz gibt Bedingungen an, die hinreichend sind für die Konvergenz der Folge (x_n) gegen die gesuchte Lösung ξ von $f(x) = 0$.

Satz 5.5.2. Sei f auf $[a, b]$ zweimal stetig differenzierbar. Es gelte $f(a) \cdot f(b) < 0$ (d.h. f hat einen Vorzeichenwechsel in $[a, b]$), $f'(x) \neq 0$ in $[a, b]$ sowie

$$\left| \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \right| \leq q \quad \text{in } [a, b] \quad \text{mit einem } q < 1.$$

Dann konvergiert die nach der Vorschrift (5.1) gebildete Folge von Näherungswerten bei beliebigem Startwert $x_0 \in [a, b]$ gegen die Lösung ξ der Gleichung $f(x) = 0$.

Bemerkungen 5.5.3:

- (i) Wegen $f'(\xi) \neq 0$ (nach Vorschrift) und $f(\xi) = 0$ sind die Werte von $\frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2}$ in einer hinreichend kleinen Umgebung von ξ beliebig klein. Das Newton-Verfahren konvergiert im Fall $f'(\xi) \neq 0$ also immer, wenn nur der Startwert x_0 ausreichend nahe bei ξ liegt.
- (ii) In der Praxis verzichtet man oft auf die Nachprüfung der Abschätzung im Satz 5.5.2. Wenn Konvergenz eintritt, dann sicher gegen eine Nullstelle.
- (iii) Man kann zeigen, dass das Newton-Verfahren auch im Fall $f'(\xi) = 0$ für genügend nahe Startwerte noch konvergiert - allerdings nicht mehr so schnell.

Fortsetzung des Beispiels 5.5.1: Nach 1.) kann hier $[a, b] = [0, 1]$ gewählt werden. Dann gilt

$$\left| \frac{f(x)f''(x)}{f'(x)^2} \right| = \left| \frac{(x - e^{-x})(-e^{-x})}{(1 + e^{-x})^2} \right| \leq \frac{|x + e^{-x}|}{(1 + e^{-x})^2} \leq \frac{1 + e^{-x}}{(1 + e^{-x})^2} \leq \frac{1}{1 + 1/e} =: q < 1$$

in $[0, 1]$. Nach Satz 5.5.2 ist die Folge der x_n also konvergent gegen die gesuchte Lösung

$$\xi = 0.56714329 \dots \quad \text{von } x = e^{-x}.$$

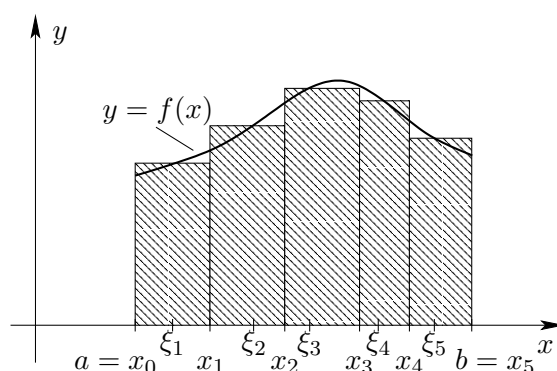
Kapitel 6

Integration

6.1 Das bestimmte Integral

Historischer Ausgangspunkt waren Probleme der Flächenberechnung.

Grundaufgabe: Berechne die Fläche zwischen einer Kurve $y = f(x)$ und der x -Achse im Bereich $a \leq x \leq b$ (hierbei sei zunächst $f(x) \geq 0$).



Idee: Approximiere die Fläche folgendermaßen durch Rechtecke:

- Zerlege $[a, b]$ in n Teilintervalle: $a = x_0 < x_1 < x_2 \dots < x_n = b$. Dann heißt

$$Z = (x_0, x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Zerlegung von $[a, b]$.

- Wähle aus jedem Teilintervall $[x_{i-1}, x_i]$ eine Zwischenstelle $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$.
- Verwende als Näherung für den Flächeninhalt über der Grundfläche $[x_{i-1}, x_i]$ die Rechteckfläche $f(\xi_i)(x_i - x_{i-1})$.

Dies liefert als Näherung für die Gesamtfläche die *Zerlegungssumme* (Riemannsumme)

$$S(Z, \xi) = \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}).$$

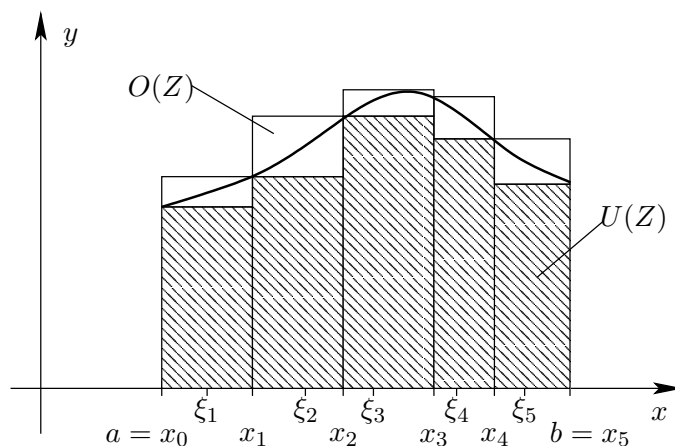
Man betrachtet nun immer feinere Zerlegungen, um als Grenzwert den exakten Flächeninhalt zu bekommen. Dabei versteht man unter der *Feinheit* $l(Z)$ einer Zerlegung Z die Länge des größten Teilintervalls, d.h. $l(Z) = \max_{i=1, \dots, n} (x_i - x_{i-1})$.

Definition 6.1.1. Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ beschränkt. Dann heißt f über $[a, b]$ *integrierbar*, wenn für jede Folge von Zerlegungen Z_n von $[a, b]$ mit $l(Z_n) \rightarrow 0$ und beliebiger Wahl von Zwischenstellen ξ_i^n , die Folge der Zerlegungssummen $S(Z_n, \xi^n)$ stets konvergent ist und immer denselben Grenzwert besitzt. Dieser Grenzwert heißt das *bestimmte Integral von f über $[a, b]$* , und wird mit

$$\int_a^b f(x) dx$$

bezeichnet.

Bemerkung 6.1.2. Wählt man Zwischenstellen $\xi_i \in [x_{i-1}, x_i]$, so dass $f(\xi_i) = \min_{[x_{i-1}, x_i]} f(x)$ gilt, so erhält man die *Untersumme* $U(Z)$ für die Zerlegung Z . Entsprechend bekommt man die *Obersumme* $O(Z)$, wenn man ξ_i mit $f(\xi_i) = \max_{[x_{i-1}, x_i]} f(x)$ verwendet. Geometrisch entspricht dies der Verwendung „eingeschriebener“ bzw. „umschriebener“ Rechtecke (siehe Skizze). Es gilt stets $U(Z) \leq S(Z, \xi) \leq O(Z)$.



In Definition 6.1.1 kann man äquivalent auch verlangen, daß $U(Z_n)$ und $O(Z_n)$ stets konvergent sind und immer denselben gemeinsamen Grenzwert haben.

Der folgende Satz gibt eine wichtige hinreichende Bedingung für die Integrierbarkeit.

Satz 6.1.3. Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann ist f über $[a, b]$ integrierbar.

Bemerkungen 6.1.4:

- (i) Wenn f auf $[a, b]$ integrierbar ist, kann man zur Berechnung von $\int_a^b f(x) dx$ möglichst günstige Zerlegungen und Zwischenstellen verwenden.
- (ii) Die Bezeichnung der Integrationsvariablen ist willkürlich! Zum Beispiel ist

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b f(t) dt.$$

Beispiele 6.1.5:

- (a) $\int_0^b x^2 dx$. Es ist $f(x) = x^2$ stetig, also nach Satz 6.1.3 integrierbar.

Verwende hier *äquidistante* Zerlegungen: $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ mit $x_i = i \frac{b}{n}$.

Zwischenstellen: $\xi_i = x_i$. Dann erhält man

$$S_n(= S(Z_n, \xi^n)) = \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) = \sum_{i=1}^n \left(i \frac{b}{n}\right)^2 \frac{b}{n} = \left(\frac{b}{n}\right)^3 \sum_{i=1}^n i^2.$$

Es ist $\sum_{i=1}^n i^2 = \frac{1}{6} n(n+1)(2n+1)$ (Beweis mit vollständiger Induktion), und damit

$$\lim_{n \rightarrow \infty} S_n = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{6} b^3 \frac{n(n+1)(2n+1)}{n \cdot n \cdot n} = \frac{1}{3} b^3.$$

Fazit: $\int_0^b x^2 dx = \frac{1}{3} b^3.$

(b) $\int_1^b \frac{dx}{x}$ für $b > 1$. Die Funktion $f(x) = \frac{1}{x}$ ist für $x > 0$ stetig, also integrierbar.

Zerlege $[1, b]$ durch $x_i = b^{i/n}$ ($i = 0, \dots, n$) und wähle $\xi_i = x_{i-1}$. Dann erhält man

$$S_n = \sum_{i=1}^n f(\xi_i)(x_i - x_{i-1}) = \sum_{i=1}^n b^{-\frac{i-1}{n}} \left(b^{\frac{i}{n}} - b^{\frac{i-1}{n}}\right) = \sum_{i=1}^n (b^{\frac{1}{n}} - 1),$$

also $S_n = n(b^{\frac{1}{n}} - 1)$. Es gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n(b^{\frac{1}{n}} - 1) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b^{\frac{1}{n}} - 1}{1/n} = \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{b^x - 1}{x} = \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{e^{x \ln b} - 1}{x} = \ln b,$$

wobei im letzten Schritt die Regel von de L'Hôpital verwendet wurde.

Fazit: $\int_1^b \frac{dx}{x} = \ln b.$

6.2 Eigenschaften des bestimmten Integrals

6.2.1 Rechenregeln

Satz 6.2.1. Seien f und g auf $[a, b]$ integrierbar. Dann gilt

- (i) $\int_a^b f(x) dx = \int_a^c f(x) dx + \int_c^b f(x) dx$ für $c \in (a, b)$
- (ii) $\int_a^b (\alpha f(x) + \beta g(x)) dx = \alpha \int_a^b f(x) dx + \beta \int_a^b g(x) dx$ für $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$
- (iii) Aus $f(x) \leq g(x)$ auf $[a, b]$ folgt $\int_a^b f(x) dx \leq \int_a^b g(x) dx$
- (iv) $\left| \int_a^b f(x) dx \right| \leq \int_a^b |f(x)| dx$

Bemerkungen 6.2.2:

(a) Teil (i) bleibt für beliebiges c richtig, falls die Teilintegrale existieren. Dabei definiert man

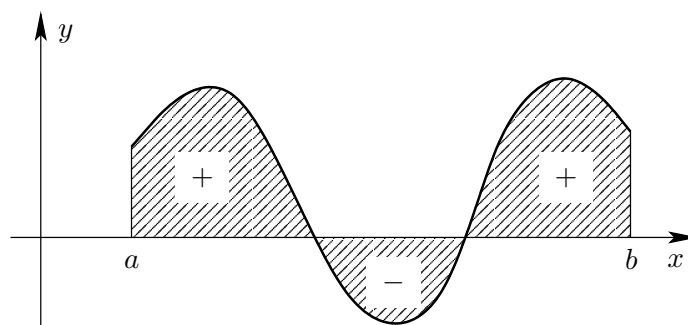
$$\int_a^a f(x) dx := 0 \quad \text{und} \quad \int_a^b f(x) dx := - \int_b^a f(x) dx \quad \text{für } a > b.$$

(b) Kombination von Satz 6.1.3 und Satz 6.2.1 (i) zeigt, dass alle stückweise stetigen Funktionen integrierbar sind.

6.2.2 Flächeninhalt

Ist $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ integrierbar mit $f(x) \geq 0$ auf $[a, b]$ und $a \leq b$, so ist $A := \int_a^b f(x) dx$ der Inhalt der Fläche zwischen dem Graphen von f und der x -Achse. Im Fall $f(x) \leq 0$ auf $[a, b]$ ist der Flächeninhalt durch $A := - \int_a^b f(x) dx$ gegeben. Allgemein gilt

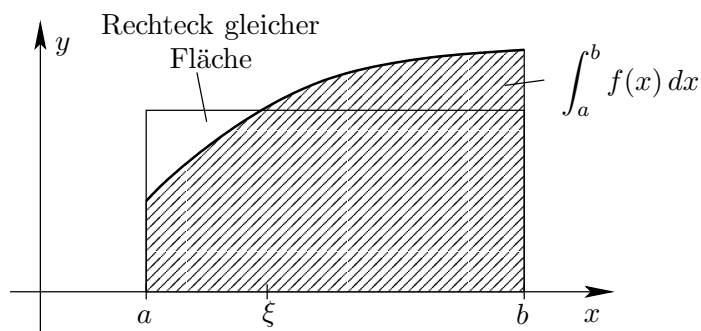
$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &= \{\text{Flächeninhalt der Bereiche oberhalb der } x\text{-Achse}\} \\ &- \{\text{Flächeninhalt der Bereiche unterhalb der } x\text{-Achse}\} \end{aligned}$$

**6.2.3 Mittelwertsatz der Integralrechnung**

Satz 6.2.3. Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig. Dann gibt es ein $\xi \in (a, b)$ mit

$$\int_a^b f(x) dx = f(\xi)(b - a).$$

Geometrische Bedeutung: Die Fläche zwischen der x -Achse und der Kurve $y = f(x)$ (im Bereich $a \leq x \leq b$) ist gleich der Rechtecksfläche über $[a, b]$ mit der Höhe $f(\xi)$ für eine Stelle $\xi \in (a, b)$.



6.3 Zusammenhang zwischen Differential- und Integralrechnung

Wie kann man $\int_a^b f(x) dx$ ohne Betrachtung von Zerlegungssummen berechnen?

Satz 6.3.1 (Hauptsatz der Differential- und Integralrechnung).

(i) Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ stetig, $x_0 \in [a, b]$ beliebig und $F(x) := \int_{x_0}^x f(t) dt$ für $x \in [a, b]$.

Dann ist F differenzierbar und es gilt $F'(x) = f(x)$ für $x \in [a, b]$.

(ii) Sei $F : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine stetig differenzierbare Funktion mit $F'(x) = f(x)$ für $x \in [a, b]$. Dann gilt

$$\int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a) =: F(x) \Big|_a^b$$

Beweis.

(i) Es ist

$$F(x+h) - F(x) = \int_{x_0}^{x+h} f(t) dt - \int_{x_0}^x f(t) dt = \int_x^{x+h} f(t) dt.$$

Nach Satz 6.2.3 gibt es eine Stelle ξ zwischen x und $x+h$ mit

$$\int_x^{x+h} f(t) dt = f(\xi) \cdot h$$

Dabei hängt ξ von h ab, also $\xi = \xi(h)$, und wegen $x < \xi(h) < x+h$ gilt $\xi(h) \rightarrow x$ für $h \rightarrow 0$. Daher folgt

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{F(x+h) - F(x)}{h} = \lim_{h \rightarrow 0} f(\xi(h)) = f(x),$$

da f nach Voraussetzung stetig ist. Also existiert $F'(x)$ und es ist $F'(x) = f(x)$.

(ii) Setze $G(x) = \int_a^x f(t) dt$. Dann ist $G(a) = 0$ und $G(b) = \int_a^b f(x) dx$.

Nach Teil (i) dieses Satzes gilt $G'(x) = f(x)$, also folgt

$$(F - G)'(x) = 0 \quad \text{für alle } x \text{ in } [a, b].$$

Nach Korollar 5.3.3 (i) ist $F - G$ konstant, insbesondere $F(a) - G(a) = F(b) - G(b)$ und damit

$$F(b) - F(a) = G(b) - G(a) = \int_a^b f(x) dx. \quad \square$$

Bemerkung 6.3.2. Eine differenzierbare Funktion F mit $F'(x) = f(x)$ auf $[a, b]$ heißt *Stammfunktion von f* . Sind F und G zwei Stammfunktionen von f , so gilt $(F - G)' = 0$, also $G(x) = F(x) + c$ mit einer Konstante $c \in \mathbb{R}$. Man erhält also alle Stammfunktionen zu f durch Addition von Konstanten. Eine Stammfunktion von f nennt man auch *unbestimmtes Integral von f* und schreibt dafür $\int f(x) dx$. Um alle Stammfunktionen von f anzugeben, wird die (frei wählbare) sogenannte Integrationskonstante c mit aufgeführt.

Liste einiger Stammfunktionen.

$\int x^r dx = \frac{1}{r+1} x^{r+1} + c \quad \text{für } r \neq -1$	
$\int \frac{dx}{x} = \ln x + c$	$\int e^x dx = e^x + c$
$\int \sin x dx = -\cos x + c$	$\int \cos x dx = \sin x + c$
$\int \frac{dx}{1+x^2} = \arctan x + c$	$\int \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}} = \arcsin x + c$
$\int \frac{dx}{\cos^2 x} = \tan x + c$	$\int \frac{dx}{\sin^2 x} = -\cot x + c$

6.4 Integrationsmethoden**6.4.1 Partielle Integration (Produktregel)**

Unbestimmte Integration der Produktregel $(fg)' = f'g + fg'$ liefert

$$\int f'(x)g(x) dx = f(x)g(x) - \int f(x)g'(x) dx,$$

und damit

$$\int_a^b f'(x)g(x) dx = f(x)g(x) \Big|_a^b - \int_a^b f(x)g'(x) dx.$$

Anwendung zur Berechnung von $\int h(x) dx$: Versuche h als $f'g$ zu schreiben, und zwar so, daß $\int fg' dx$ einfacher zu berechnen ist.

Beispiele 6.4.1:

(a) $\int x \sin x dx = ?$ Hier: $g(x) = x, f'(x) = \sin x \Rightarrow f(x)g'(x) = -\cos x$
 $\Rightarrow \int x \sin x dx = -x \cos x - \int 1 \cdot (-\cos x) dx = -x \cos x + \int \cos x dx$
 $= -x \cos x + \sin x + c$

(b) $\int \ln x dx = ?$ Hier: $(\ln x)' = \frac{1}{x}$; deshalb $g(x) = \ln x$, also $f'(x) = 1$.
 $\Rightarrow \int \ln x dx = x \ln x - \int x \frac{1}{x} dx = x \ln x - \int dx = x \ln x - x + c.$

(c) $\int \sin^2 x dx = \int \sin x \sin x dx = -\cos x \sin x + \int \cos^2 x dx \quad \Big| + \int \sin^2 x dx$
 $\Rightarrow 2 \int \sin^2 x dx = -\sin x \cos x + \int dx \Rightarrow \int \sin^2 x dx = \frac{x - \sin x \cos x}{2} + c$

6.4.2 Substitution (Kettenregel)

Für differenzierbare Funktionen F und g gilt $F(g(t))' = F'(g(t))g'(t)$ nach der Kettenregel. Also folgt mit $f = F'$:

$$\int f(g(t))g'(t) dt = \int F(g(t))' dt = F(g(t)) + c.$$

In die Stammfunktion F von f ist also $g(t)$ als Argument einzusetzen. Als Abkürzung für diese Ersetzung verwendet man die Schreibweise: $[h(x)]_{x=g(t)} := h(g(t))$.

Dann lautet die Substitutionsregel für unbestimmte Integrale

$$\boxed{\int f(g(t))g'(t) dt = \left[\int f(x) dx \right]_{x=g(t)}},$$

falls f stetig und g stetig differenzierbar ist.

Beispiel 6.4.2: $\int \sin t \cos^2 t dt = - \int \cos^2 t (\cos t)' dt$; hier: $g(t) = \cos t$, $f(x) = x^2$. Also folgt

$$\int \sin t \cos^2 t dt = \left[- \int x^2 dx \right]_{x=\cos t} = \left[-\frac{1}{3}x^3 + c \right]_{x=\cos t} = -\frac{1}{3}\cos^3 t + c.$$

Oft wird die Substitutionsregel „von rechts nach links“ angewendet; dazu benötigt man die Umkehrbarkeit von g . Es gilt

$$\boxed{\int f(x) dx = \left[\int f(g(t))g'(t) dt \right]_{t=g^{-1}(x)}},$$

falls f stetig und g stetig differenzierbar mit $g'(t) \neq 0$ ist.

Beispiel 6.4.3: $\int \frac{e^x}{e^{2x} + 1} dx = ?$

Hier: $e^x = t$ substituieren; also $x = \ln t$, d.h. $g(t) = \ln t$, $g'(t) = \frac{1}{t}$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \frac{e^x}{e^{2x} + 1} dx &= \left[\int \frac{e^{\ln t}}{e^{2 \ln t} + 1} \frac{1}{t} dt \right]_{t=e^x} = \left[\int \frac{t}{t^2 + 1} \frac{1}{t} dt \right]_{t=e^x} = \left[\int \frac{dt}{t^2 + 1} \right]_{t=e^x} \\ &= \left[\arctan t + c \right]_{t=e^x} = \arctan(e^x) + c. \end{aligned}$$

Beim Anwenden der Substitutionsregel benutzt man oft die Leibniz'sche Schreibweise, d.h. $\frac{dx}{dt}$ für $x'(t)$, und rechnet mit $\frac{dx}{dt}$ formal wie mit einem gewöhnlichen Bruch; im Beispiel von oben:

$$e^x = t \quad \Rightarrow \quad \frac{dt}{dx} = e^x, \text{ also } dt = e^x dx \quad \Rightarrow \quad \int \frac{e^x}{e^{2x} + 1} dx = \int \frac{dt}{t^2 + 1}$$

Dabei wird die Ersetzungsklammer $[\dots]_{t=g^{-1}(x)}$ meist weggelassen. Anschließend muss an die Rücksubstitution gedacht werden!

Beispiel 6.4.4: $\int \sin \sqrt{x} dx = ?$

Substitution: $t = \sqrt{x} \Rightarrow x = t^2, dx = 2t dt$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \sin \sqrt{x} dx &= \int (\sin t) 2t dt = 2 \int t \sin t dt \\ &= 2t(-\cos t) - 2 \int (-\cos t) dt = -2t \cos t + 2 \sin t + c. \end{aligned}$$

Rücksubstitution:

$$\int \sin \sqrt{x} dx = -2\sqrt{x} \cos \sqrt{x} + 2 \sin \sqrt{x} + c.$$

Bemerkung 6.4.5. Das Ergebnis einer unbestimmten Integration kann durch Differenzieren leicht nachgeprüft werden!

Bei Substitution in bestimmten Integralen sind die Grenzen mit zu transformieren:

$$\boxed{\int_a^b f(g(t))g'(t) dt = \int_\alpha^\beta f(x) dx \quad \text{mit } \alpha = g(a), \beta = g(b),}$$

falls f stetig und g stetig differenzierbar ist.

Beispiel 6.4.6: $\int_1^e \frac{dt}{t(1+\ln t)} = ?$

Substitution: $x = \ln t, dx = \frac{1}{t} dt$ (also $g(t) = \ln t, f(x) = \frac{1}{x+1}$)

$$\Rightarrow \int_1^e \frac{dt}{t(1+\ln t)} = \int_{\ln 1}^{\ln e} \frac{dx}{1+x} = \int_0^1 \frac{dx}{1+x} = \ln |1+x| \Big|_0^1 = \ln 2.$$

6.4.3 Einige Standardsubstitutionen

(a) Integrale mit (ganzzahligen) *Potenzen von e^x* :

Substituiere $t = e^x \Rightarrow dt = e^x dx, dx = \frac{1}{t} dt$

Beispiele 6.4.7:

$$(a) \int \frac{1+e^{2x}}{e^x} dx = \int \frac{1+t^2}{t} \cdot \frac{1}{t} dt = \int \left(1 + \frac{1}{t^2}\right) dt = t - \frac{1}{t} + c = e^x - e^{-x} + c.$$

$$(b) \int \frac{\cosh x}{1+e^x} dx = ? \quad \text{Beachte: } \cosh x, \sinh x \text{ sind mittels } e^x, e^{-x} \text{ definiert!}$$

$$\begin{aligned} \int \frac{\cosh x}{1+e^x} dx &= \frac{1}{2} \int \frac{e^x + e^{-x}}{1+e^x} dx = \frac{1}{2} \int \frac{t + \frac{1}{t}}{1+t} \frac{1}{t} dt = \frac{1}{2} \int \frac{t^2 + 1}{t^2 + t^3} dt \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{1}{1+t} dt + \frac{1}{2} \int \frac{dt}{t^2 + t^3} = \frac{1}{2} \ln |1+t| + \frac{1}{2} \int \frac{dt}{t^2 + t^3}. \end{aligned}$$

Unklar ist: wie berechnet man $\int \frac{dt}{t^2 + t^3}$? Dies später („Partialbruchzerlegung“).

(b) Integrale mit *Potenzen von x und $\sqrt[n]{ax+b}$* ($n \in \mathbb{N}$):

Substituiere $t = \sqrt[n]{ax+b} \Rightarrow x = \frac{t^n - b}{a}, dx = \frac{n}{a} t^{n-1} dt$.

Beispiele 6.4.8:

(a) $\int \frac{x}{\sqrt{x-1}} dx = ?$ Hier: $t = \sqrt{x-1}, x = t^2 + 1, dx = 2t dt$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \int \frac{x}{\sqrt{x-1}} dx &= \int \frac{t^2+1}{t} 2t dt = 2 \int (t^2+1) dt = \frac{2}{3} t^3 + 2t + c \\ &= \frac{2}{3} (x-1)^{\frac{3}{2}} + 2(x-1)^{\frac{1}{2}} + c. \end{aligned}$$

(b) $\int \frac{\sqrt[3]{x+1}}{x} dx = ?$ Hier: $t = \sqrt[3]{x+1}, x = t^3 - 1, dx = 3t^2 dt$

$$\Rightarrow \int \frac{\sqrt[3]{x+1}}{x} dx = \int \frac{t}{t^3-1} 3t^2 dt = 3 \int \frac{t^3}{t^3-1} dt = 3t + 3 \int \frac{dt}{t^3-1}.$$

Unklar ist: wie berechnet man $\int \frac{dt}{t^3-1}$? Dazu später.

(c) Integrale mit *Potenzen von x und $\sqrt{1-x^2}$* :

Substituiere $x = \sin t \Rightarrow dx = \cos t dt, \sqrt{1-x^2} = \cos t$.

Beispiele 6.4.9:

(a) $\int x^2 \sqrt{1-x^2} dx = \int \sin^2 t \cos^2 t dt = \frac{1}{4} \int \sin^2 2t dt$

Mit der Substitution $y = 2t, dy = 2 dt$ erhält man weiter

$$= \frac{1}{8} \int \sin^2 y dy = \frac{y - \sin y \cos y}{16}.$$

Nach Rücktransformationen folgt daraus

$$\int x^2 \sqrt{1-x^2} dx = \frac{1}{8} \arcsin x - \frac{1}{8} x (1-x^2)^{\frac{3}{2}} + \frac{1}{8} x^3 (1-x^2)^{\frac{1}{2}}.$$

(b) $\int x \sqrt{1-x^2} dx$. Hier besser $y = 1-x^2$ substituieren, denn $\frac{dy}{dx} = -2x$ und der Integrand enthält den Faktor x .

$$\Rightarrow \int x \sqrt{1-x^2} dx = -\frac{1}{2} \int \sqrt{y} dy = -\frac{1}{3} y^{\frac{3}{2}} = -\frac{1}{3} (1-x^2)^{\frac{3}{2}}$$

(d) Integrale mit *Potenzen von x und $\sqrt{x^2-1}$* :

Substituiere $x = \cosh t \Rightarrow dx = \sinh t dt, \sqrt{x^2-1} = \sinh t$.

Beispiel 6.4.10: $\int \sqrt{x^2-1} dx = \int \sinh^2 t dt$. Mit partieller Integration erhält man

$$\int \sqrt{x^2-1} dx = \frac{1}{2} \cosh t \sinh t - \frac{t}{2} = \frac{1}{2} x \sqrt{x^2-1} - \frac{1}{2} \operatorname{arcosh} x$$

(e) Integrale mit *Potenzen von x und $\sqrt{x^2+1}$* :

Substituiere $x = \sinh t \Rightarrow dx = \cosh t dt, \sqrt{x^2 + 1} = \cosh t$

$$\begin{aligned} \textbf{Beispiel 6.4.11: } \int \sqrt{1 + \frac{1}{x^2}} dx &= \int \frac{\sqrt{x^2 + 1}}{x} dx \quad (\text{für } x > 0) = \int \frac{\cosh^2 t}{\sinh t} dt \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{e^{2t} + 2 + e^{-2t}}{e^t - e^{-t}} dt = \frac{1}{2} \int \frac{y^2 + 2 + \frac{1}{y^2}}{y - \frac{1}{y}} \frac{1}{y} dy \quad (\text{nach Substitution } y = e^t) \\ &= \frac{1}{2} \int \frac{y^4 + 2y^2 + 1}{y^4 - y^2} dy = \frac{1}{2} \int dy + \frac{1}{2} \int \frac{3y^2 + 1}{y^4 - y^2} dy \end{aligned}$$

Unklar: wie berechnet man $\int \frac{3y^2 + 1}{y^4 - y^2} dy$?

Diese Beispiele zeigen, dass man oft Stammfunktionen von rationalen Funktionen (also Funktionen der Form $P(x)/Q(x)$ mit Polynomen P, Q) bestimmen muss. Dazu benötigt man die sogenannte

6.4.4 Partialbruchzerlegung

Aufgabe: Berechne $\int \frac{P(x)}{Q(x)} dx$ für gegebene Polynome P und Q .

Grundidee: Schreibe die rationale Funktion $\frac{P(x)}{Q(x)}$ als Summe einfacher Brüche, etwa

$$\frac{1}{x^2 - x} = \frac{1}{x(x-1)} = \frac{1}{x-1} - \frac{1}{x}.$$

Beispiel 6.4.12: $P(x) = x^4 - 8x^2 - 4x + 13$, $Q(x) = x^3 - 2x^2 - 5x + 6$, also

$$\int \frac{x^4 - 8x^2 - 4x + 13}{x^3 - 2x^2 - 5x + 6} dx$$

Es sind folgende Schritte auszuführen:

(a) *Polynomdivision* solange, bis Grad des Zählers kleiner als Grad des Nenners ist.

$$(x^4 - 8x^2 - 4x + 13) : (x^3 - 2x^2 - 5x + 6) = x + 2 + \frac{x^2 + 1}{x^3 - 2x^2 - 5x + 6}$$

(b) *Zerlege den Nenner.*

$$x^3 - 2x^2 - 5x + 6 = (x-1)(x+2)(x-3)$$

(c) *Partialbruchzerlegung.*

(i) Wenn alle Nullstellen des Nenners reell und verschieden sind:

$$\text{Ansatz: } \frac{x^2 + 1}{(x-3)(x-1)(x+2)} = \frac{A}{x-3} + \frac{B}{x-1} + \frac{C}{x+2}$$

Ansatz auf gemeinsamen Nenner bringen; dies ergibt

$$\begin{aligned}\frac{x^2 + 1}{(x-3)(x-1)(x+2)} &= \frac{A(x-1)(x+2) + B(x-3)(x+2) + C(x-3)(x-1)}{(x-3)(x-1)(x+2)} \\ &= \frac{A(x^2 + x - 2) + B(x^2 - x - 6) + C(x^2 - 4x + 3)}{(x-3)(x-1)(x+2)}\end{aligned}$$

Koeffizientenvergleich, d.h. die Faktoren der gleichen x -Potenzen müssen links und rechts übereinstimmen. Dies liefert das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}A + B + C &= 1 \\ A - B - 4C &= 0 \\ -2A - 6B + 3C &= 1\end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \dots \Rightarrow \quad A = 1, \quad B = -\frac{1}{3}, \quad C = \frac{1}{3}.$$

Ergebnis:

$$\int \frac{x^2 + 1}{x^3 - 2x^2 - 5x + 6} dx = \int \frac{dx}{x-3} - \frac{1}{3} \int \frac{dx}{x-1} + \frac{1}{3} \int \frac{dx}{x+2} = \dots$$

(ii) Wenn der Nenner mehrfache reelle Nullstellen hat:

Beispiel 6.4.13: $P(x) = 1$, $Q(x) = (x-1)^2(x+2)$.

$$\text{Ansatz: } \frac{1}{(x-1)^2(x+2)} = \frac{A}{x-1} + \frac{B}{(x-1)^2} + \frac{C}{x+2}$$

Weiter wie in (i); dies gibt die Koeffizienten $A = -\frac{1}{9}$, $B = \frac{1}{3}$, $C = \frac{1}{9}$

$$\text{Ergebnis: } \int \frac{dx}{Q(x)} = -\frac{1}{9} \ln|x-1| - \frac{1}{3} \frac{1}{x-1} + \frac{1}{9} \ln|x+2|.$$

(iii) Wenn nicht alle Nullstellen des Nenners reell sind:

Beispiel 6.4.14: $P(x) = 1$, $Q(x) = (x-1)(x^2+1)$.

$$\text{Ansatz: } \frac{1}{(x-1)(x^2+1)} = \frac{A}{x-1} + \frac{Bx+C}{x^2+1}.$$

Weiter wie in (i); dies gibt die Koeffizienten $A = \frac{1}{2}$, $B = C = -\frac{1}{2}$.

$$\text{Ergebnis: } \int \frac{dx}{Q(x)} = \frac{1}{2} \ln|x-1| - \frac{1}{2} \int \frac{x+1}{x^2+1} dx.$$

Allgemein: *Rechenschema für die Integration rationaler Funktionen.*

Gesucht ist $\int \frac{P(x)}{Q(x)} dx$ für Polynome P und Q .

1. *Schritt:* Ist Grad von $P <$ Grad von Q ? Falls ja: weiter mit Schritt 2. Falls nein: Teile $P(x)$ durch $Q(x)$ mit Rest. Dies liefert

$$\frac{P(x)}{Q(x)} = R(x) + \frac{\tilde{P}(x)}{Q(x)}$$

mit den Polynomen R , \tilde{P} wobei Grad von \tilde{P} kleiner als Grad von Q ist. Der Teil $\int R(x) dx$ ist leicht zu berechnen. Wende daher die folgenden Schritte auf $\frac{\tilde{P}}{Q}$ an.

2. *Schritt*: Zerlegung von $Q(x)$ in Faktoren der Form $(x-a)^m$ und $((x-a)^2+b^2)^n$. Dazu sind zunächst alle reellen Nullstellen von Q zu bestimmen (schwierig!).

Jede dieser Nullstellen liefert einen Faktor der Form $(x-a)$. Dies ergibt die Zerlegung

$$Q(x) = (x-x_1)^{m_1} (x-x_2)^{m_2} \dots t(x-x_k)^{m_k} Q_r(x)$$

mit einem Polynom $Q_r(x)$ ohne reelle Nullstelle. Anschließend ist Q_r in quadratische Faktoren zu zerlegen.

3. *Schritt*: Aufspalten von $\frac{P(x)}{Q(x)}$ in Partialbrüche. Verwende dazu für

den Faktor in $Q(x)$	den Ansatz
$(x-a)^m$	$\frac{A_1}{x-a} + \frac{A_2}{(x-a)^2} + \dots + \frac{A_m}{(x-a)^m}$
$((x-a)^2+b^2)^n$	$\frac{A_1x+B_1}{(x-a)^2+b^2} + \frac{A_2x+B_2}{((x-a)^2+b^2)^2} + \dots + \frac{A_nx+B_n}{((x-a)^2+b^2)^n}$

Berechnung der Konstanten A_i, B_i durch Koeffizientenvergleich oder Einsetzen spezieller Werte für x oder „Grenzwertverfahren“ (siehe unten).

4. *Schritt*: Integration der Partialbrüche. Verwende dazu

$$\int \frac{dx}{x-a} = \ln|x-a| + c$$

$$\int \frac{dx}{(x-a)^m} = -\frac{1}{m-1} \frac{1}{(x-a)^{m-1}} + c \quad (\text{für } m \geq 2)$$

$$\int \frac{Ax+B}{(x-a)^2+b^2} dx = \frac{A}{2} \ln|(x-a)^2+b^2| + \frac{Aa+B}{b} \arctan\left(\frac{x-a}{b}\right) + c$$

Für den Nenner $((x-a)^2+b^2)^n$ mit $n \geq 2$ lässt sich durch partielle Integration eine Rekursionsformel herleiten (\rightarrow Übung). Man kann beweisen, dass die Schritte 1–4 stets durchführbar sind. Daher sind alle rationalen Funktionen elementar integrierbar.

Beispiele 6.4.15:

(a) Ansatz zur Partialbruchzerlegung von $\frac{P(x)}{Q(x)}$ mit

$$Q(x) = (x-1)(x-2)^3(x^2+1)^2((x-3)^2+9) \quad (\text{Grad von } P \leq 9)$$

$$\frac{A_1}{x-1} + \frac{A_2}{x-2} + \frac{A_3}{(x-2)^2} + \frac{A_4}{(x-2)^3} + \frac{A_5x+A_6}{x^2+1} + \frac{A_7x+A_8}{(x^2+1)^2} + \frac{A_9x+A_{10}}{(x-3)^2+9}$$

(b) Berechne $\int \frac{x^3+5x}{x^4-6x^2+8x+24} dx$

1. *Schritt*: Entfällt.

2. *Schritt*: Ausprobieren von $x = \pm 1, \pm 2, \dots$ liefert $x = -2$ als doppelte Nullstelle des Nennerpolynoms.

$$\Rightarrow Q(x) = (x+2)^2(x^2-4x+6).$$

Weitere reelle Nullstelle? $x^2-4x+6 = (x-2)^2+2$, also keine reellen Nullstellen.

3. Schritt: Ansatz

$$\frac{x^3 + 5x}{(x+2)^2((x-2)^2 + 2)} = \frac{A}{x+2} + \frac{B}{(x+2)^2} + \frac{Cx+D}{(x-2)^2 + 2}.$$

Berechnung von B durch Grenzwertverfahren: Multipliziere beide Seiten mit $(x+2)^2$. Auf der rechten Seite lautet der mittlere Summand dann B , und die anderen Summanden enthalten (mindestens einmal) den Faktor $(x+2)$. Lässt man nun x gegen -2 gehen, so bleibt auf der rechten Seite nur B stehen!

Insgesamt erhält man so $\frac{(-2)^3 + 5(-2)}{(-4)^2 + 2} = B$, also $B = -1$.

Zur Bestimmung der restlichen Koeffizienten kann man z.B. drei spezielle Werte für x einsetzen. Dies gibt drei Gleichungen für die drei Unbekannten A, C, D .

$$x = 0 : \quad 0 = \frac{A}{2} + \frac{-1}{4} + \frac{D}{6}$$

$$x = 1 : \quad \frac{6}{9 \cdot 3} = \frac{A}{3} + \frac{-1}{9} + \frac{C+D}{3}$$

$$x = 3 : \quad \frac{18}{16 \cdot 2} = \frac{A}{4} + \frac{-1}{16} + \frac{2C+D}{2}$$

$$3A + D = \frac{3}{2}$$

$$\Rightarrow \quad A + C + D = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{2}, \quad B = \frac{1}{2}, \quad D = 0$$

$$A + 4C + 2D = \frac{5}{2}$$

4. Schritt:

$$\begin{aligned} \int \frac{P(x)}{Q(x)} dx &= \frac{1}{2} \int \frac{dx}{x+2} - \int \frac{dx}{(x+2)^2} + \frac{1}{2} \int \frac{x}{(x-2)^2 + 2} dx \\ &= \frac{1}{2} \ln|x+2| + \frac{1}{x+2} + \frac{1}{4} \ln|(x-2)^2 + 2| + \frac{1}{\sqrt{2}} \arctan\left(\frac{x-2}{\sqrt{2}}\right) + c \end{aligned}$$

6.5 Uneigentliche Integrale

Unter welchen Voraussetzungen und wie lassen sich bestimmte Integrale über unbeschränkte Integrationsbereiche bzw. mit unbeschränkten Integranden definieren? Etwa

$$\int_0^\infty e^{-x} dx, \quad \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{x}} dx.$$

6.5.1 Unbeschränkter Integrationsbereich

Definition 6.5.1. Es sei $f : [a, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ auf jedem Intervall $[a, b]$ (für $b > a$) integrierbar. Falls der Grenzwert

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) dx$$

existiert, so definiert man das *uneigentliche Integral von f über $[a, \infty)$*

durch

$$\int_a^\infty f(x) dx := \lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) dx$$

Analog definiert man die uneigentlichen Integrale

$$\int_{-\infty}^b f(x) dx := \lim_{a \rightarrow -\infty} \int_a^b f(x) dx$$

und

$$\int_{-\infty}^\infty f(x) dx := \int_{-\infty}^a f(x) dx + \int_a^\infty f(x) dx \quad (\text{mit beliebigem } a \in \mathbb{R})$$

falls die rechten Seiten existieren.

Bemerkungen 6.5.2:

- (i) Wenn z.B. $\lim_{b \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) dx$ existiert, so sagt man auch $\int_a^\infty f(x) dx$ existiert oder *konvergiert*. Sonst heißt $\int_a^\infty f(x) dx$ *divergent*.

Existiert sogar $\int_a^\infty |f(x)| dx$, so heißt das Integral $\int_a^\infty f(x) dx$ *absolut konvergent*.

- (ii) F sei eine Stammfunktion von f . Dann gilt

$$\int_a^\infty f(x) dx = \lim_{b \rightarrow \infty} F(b) - F(a),$$

falls der Grenzwert existiert.

- (iii) Damit $\int_{-\infty}^\infty f(x) dx$ existiert, müssen beide Teilintegrale (d.h. die entsprechenden Grenzwerte) unabhängig voneinander existieren.

Beispiele 6.5.3:

- (a) $\int_0^\infty e^{-x} dx$; es ist $\int_0^b e^{-x} dx = -e^{-x} \Big|_0^b = -e^{-b} + 1$.

Also gilt

$$\lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b e^{-x} dx = \lim_{b \rightarrow \infty} (1 - e^{-b}) = 1, \text{ d.h. } \int_0^\infty e^{-x} dx = 1.$$

- (b) $\int_{-\infty}^\infty \frac{dx}{1+x^2}$; berechne zunächst $\int_0^\infty \frac{dx}{1+x^2}$.

$$\int_0^\infty \frac{dx}{1+x^2} = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_0^b \frac{dx}{1+x^2} = \lim_{b \rightarrow \infty} \left(\arctan x \Big|_0^b \right) = \lim_{b \rightarrow \infty} \arctan b = \frac{\pi}{2}$$

Man schreibt oft kurz:

$$\int_0^\infty \frac{dx}{1+x^2} = \arctan x \Big|_0^\infty = \frac{\pi}{2}$$

Entsprechend:

$$\int_{-\infty}^0 \frac{dx}{1+x^2} = \arctan x \Big|_{-\infty}^0 = \frac{\pi}{2} \quad \Rightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{1+x^2} = \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} = \pi.$$

(c) $\int_{-\infty}^{\infty} x \, dx = ?$

$$\int_0^{\infty} x \, dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} x^2 \Big|_0^b \right) = \lim_{b \rightarrow \infty} \frac{1}{2} b^2 = \infty$$

Fazit: $\int_{-\infty}^{\infty} x \, dx$ existiert nicht (oder: ist divergent).

Falsch wäre: $\int_{-\infty}^{\infty} x \, dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \int_{-b}^b x \, dx = \lim_{b \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{2} x^2 \Big|_{-b}^b \right) = 0.$

Satz 6.5.4 (Majorantenkriterium). Es gelte $|f(x)| \leq g(x)$ auf $[a, \infty)$ und $\int_a^{\infty} g(x) \, dx$ existiere. Dann ist $\int_a^{\infty} f(x) \, dx$ (absolut) konvergent und es gilt

$$\left| \int_a^{\infty} f(x) \, dx \right| \leq \int_a^{\infty} |f(x)| \, dx \leq \int_a^{\infty} g(x) \, dx.$$

Beispiel 6.5.5:

$$\int_1^{\infty} \frac{\sin x}{x^2} \, dx \text{ existiert, denn } \left| \frac{\sin x}{x^2} \right| \leq \frac{1}{x^2} \text{ und } \int_1^{\infty} \frac{1}{x^2} \, dx = -\frac{1}{x} \Big|_1^{\infty} = 1.$$

6.5.2 Unbeschränkter Integrand

Definition 6.5.6. Sei f stetig in $[a, b] \setminus \{x_0\}$ (typische Situation: f ist bei x_0 unbeschränkt). Unter dem uneigentlichen Integral $\int_a^b f(t) \, dt$ versteht man:

- (i) im Fall $x_0 = b$: $\lim_{x \rightarrow b-} \int_a^x f(t) \, dt,$
- (ii) im Fall $x_0 = a$: $\lim_{x \rightarrow a+} \int_x^b f(t) \, dt,$
- (iii) im Fall $x_0 \in (a, b)$: $\lim_{x \rightarrow x_0-} \int_a^x f(t) \, dt + \lim_{x \rightarrow x_0+} \int_x^b f(t) \, dt,$
falls die jeweiligen Grenzwerte existieren.

Beispiel 6.5.7: $\int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{t}};$ hier: f ist unbeschränkt bei $t_0 = 0$. Es gilt

$$\lim_{x \rightarrow 0+} \int_x^1 \frac{dt}{\sqrt{t}} = \lim_{x \rightarrow 0+} \left(2\sqrt{t} \Big|_x^1 \right) = \lim_{x \rightarrow 0+} (2 - 2\sqrt{x}) = 2.$$

allgemeiner: $\int_0^1 \frac{dt}{t^\alpha}$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$.

$$\alpha = 1 : \int_0^1 \frac{dt}{t} = \lim_{x \rightarrow 0+} \left(\ln |t| \Big|_x^1 \right) = \infty$$

$$\alpha \neq 1 : \int_0^1 \frac{dt}{t^\alpha} = \lim_{x \rightarrow 0+} \left(\frac{1}{1-\alpha} t^{1-\alpha} \Big|_x^1 \right) = \lim_{x \rightarrow 0+} \frac{1}{1-\alpha} (1 - x^{1-\alpha}) = \begin{cases} \frac{1}{1-\alpha} & \alpha < 1 \\ \infty & \alpha > 1 \end{cases}$$

Fazit: $\boxed{\int_0^1 \frac{dt}{t^\alpha} \text{ existiert} \Leftrightarrow \alpha < 1}.$

Auf diesem Beispiel basiert

Satz 6.5.8. Sei f stetig in $[a, b] \setminus \{x_0\}$. Gilt in einer Umgebung von x_0

(i) $|f(x)| \leq \frac{c}{|x - x_0|^\alpha}$ mit $\alpha < 1$ und $c \in \mathbb{R}$, so existiert $\int_a^b f(x) dx$

(ii) $|f(x)| \geq \frac{c}{|x - x_0|^\alpha}$ mit $\alpha \geq 1$ und $c \in \mathbb{R}$, so ist $\int_a^b f(x) dx$ divergent.

Der Beweis von Satz 6.5.8 (i) beruht auf dem zu Satz 6.5.4 analogen Majorantenkriterium.

Beispiele 6.5.9:

(a) $\int_0^1 \frac{dx}{1-x^2}$; hier ist $x_0 = 1$ und

$$|f(x)| = \frac{1}{|(1-x)(1+x)|} \geq \frac{1}{2|x-1|} \Rightarrow \text{Integral ist divergent.}$$

(b) $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x^2}}$; hier ist $x_0 = 1$ und

$$|f(x)| = \frac{1}{|(1-x)(1+x)|^{\frac{1}{2}}} \leq \frac{1}{|x-1|^{\frac{1}{2}}} \Rightarrow \text{Integral existiert.}$$

6.6 Numerische Integration

Für das Folgende wollen wir voraussetzen, dass das zu berechnende bestimmte Integral $\int_a^b f(x) dx$ existiert. Trotzdem kann es sein, dass es nur näherungsweise numerisch berechnet werden kann. Das trifft z.B. zu, wenn

- f keine elementare Stammfunktion besitzt, z.B. $f(x) = e^{-x^2}$,
- die Bestimmung der Stammfunktion zu kompliziert ist,
- f nur tabellarisch gegeben ist (Messwerte).

In solchen Fällen wird der zu berechnende Integralausdruck angenähert ausgewertet durch numerische Integration (Quadratur):

$$I := \int_a^b f(x) dx \approx \tilde{I} := \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

Die Gewichte w_i , die Stützstellen x_i und die Anzahl der Stützstellen und der Funktionsauswertungen n bestimmen Methode und Genauigkeit.

Die "Integration von Tabellendaten" wird hier nicht behandelt. Durch eine Wertetabelle kann eine interpolierende oder approximierende Funktion gelegt werden, die dann exakt integriert werden kann.

6.6.1 Newton-Cotes-Formeln

Dies ist die einfachste Idee: Um das Integral I zu berechnen, wird f durch ein interpolierendes Polynom p ersetzt und dieses exakt integriert. Die zur Interpolation benötigten Funktionswerte werden an $m + 1$ äquidistanten Stellen berechnet.

Für $m = 1$ und $m = 2$ ergeben sich die folgenden Formeln:

$$\text{Trapezregel : } \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2}(f(a) + f(b)),$$

$$\text{Simpsonregel : } \int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{6}(f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)).$$

Soll die Genauigkeit erhöht werden, so werden diese einfachen Näherungsformeln mehrfach aneinandergesetzt. Sei zu gegebenem n

$$h = \frac{b-a}{n} \quad \text{und} \quad x_j = a + jh, \quad j = 0, 1, \dots, n.$$

Dann liefert das Aneinanderhängen von n Trapez- bzw. $n/2$ Simpsonregeln (n gerade!) die Näherungsformeln

$$\tilde{I} = T(h) = \frac{h}{2}(f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)),$$

$$\tilde{I} = S(h) = \frac{h}{3}(f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \dots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)).$$

Sind Schranken für die 2. bzw. 4. Ableitung der zu integrierenden Funktion bekannt, so lässt sich der Fehler dieser Regeln abschätzen:

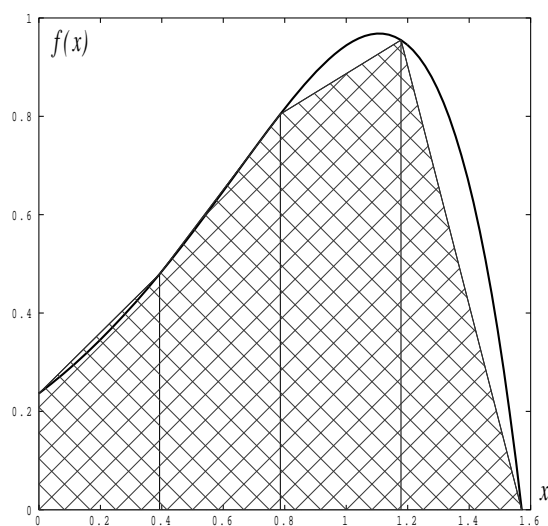
$$|I - T(h)| \leq \frac{|b-a|}{12} h^2 \max_{x \in [a,b]} |f''(x)|, \quad |I - S(h)| \leq \frac{|b-a|}{180} h^4 \max_{x \in [a,b]} |f^{(4)}(x)|.$$

Beispiel 6.6.1:

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{5.0}{e^\pi - 2} \exp(2x) \cos(x) dx = 1.0.$$

Die Zeichnung unten zeigt die Trapezfläche, die als Näherung für das Integral bei $n = 4$ entsteht, und den Integranden. Die Ergebnisse für Trapez- und Simpsonregel sind in der folgenden Tabelle festgehalten:

Regel	h	\tilde{I}	Fehler $I - \tilde{I}$	Fehlerabschätzung
Trapez	$\pi/8$	0.926	0.074	0.12
Simpson	$\pi/8$	0.9925	0.0075	0.018



Kapitel 7

Elemente der linearen Algebra

7.1 Der euklidische Raum \mathbb{R}^n

Definition 7.1.1. Unter dem *Raum* \mathbb{R}^n versteht man das kartesische Produkt $\mathbb{R} \times \mathbb{R} \times \dots \times \mathbb{R}$ (n -mal), d.h. die Menge aller n -Tupel (x_1, x_2, \dots, x_n) reeller Zahlen x_k ; kurz:

$$\mathbb{R}^n = \{(x_1, x_2, \dots, x_n) : x_k \in \mathbb{R} \text{ für } k = 1, \dots, n\}. \quad (7.1)$$

Die Komponenten x_k heißen *Koordinaten von x* . Zwei Punkte $x, y \in \mathbb{R}^n$ sind gleich, falls $x_k = y_k$ für $k = 1, \dots, n$ gilt.

Addition, sowie *Multiplikation mit Skalaren* sind komponentenweise erklärt, d.h.

$$x + y = (x_1 + y_1, x_2 + y_2, \dots, x_n + y_n) \text{ für } x, y \in \mathbb{R}^n$$

$$\lambda x = (\lambda x_1, \lambda x_2, \dots, \lambda x_n) \text{ für } x \in \mathbb{R}^n, \lambda \in \mathbb{R}.$$

Bemerkungen 7.1.2:

- (i) Aus erst später ersichtlichen rechnerischen Gründen wollen wir Elemente $x \in \mathbb{R}^n$ normalerweise als Spalten schreiben. Zeilenvektoren sind dann die Transponierten dazu:

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$$

- (ii) Jedes Element $x \in \mathbb{R}^n$ definiert einen Punkt des \mathbb{R}^n . Oft nennt man Elemente $x \in \mathbb{R}^n$ auch *Vektoren*, obwohl der genaue Zusammenhang etwas komplizierter ist (siehe unten); zur Unterscheidung werden reelle Zahlen als *Skalare* bezeichnet

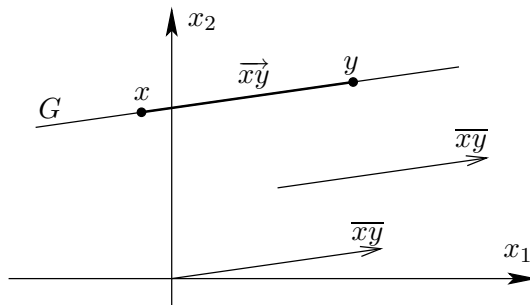
Zusammenhang zum Vektorbegriff.

- (a) *Geraden*. Es seien $x, y \in \mathbb{R}^n$ mit $x \neq y$ gegeben. Unter der durch die Punkte x und y verlaufenden Gerade versteht man die Menge

$$G = \{x + \lambda(y - x) : \lambda \in \mathbb{R}\} \quad (\text{„Zwei-Punkte-Form“}).$$

- (b) *Strecken*. Wird in der Geraden G der Skalar λ auf den Bereich $0 \leq \lambda \leq 1$ eingeschränkt, so erhält man die Strecke \overline{xy} zwischen den Punkten x und y , also

$$\overline{xy} \{x + \lambda(y - x) : 0 \leq \lambda \leq 1\}.$$



- (c) *Vektoren*. Gibt man der Strecke \overline{xy} eine *Orientierung*, indem man etwa x als Anfangs- und y als Endpunkt festlegt, so erhält man den Vektor \overrightarrow{xy} . Dabei werden alle Vektoren als gleich angesehen, die durch Parallelverschiebung ineinander übergehen. Ein Vektor hat also eine definierte Richtung und Länge, jedoch keine feste Lage im Raum.

Jeder Punkt $P = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ des \mathbb{R}^n lässt sich mit dem Vektor \overrightarrow{OP} identifizieren, der vom Koordinatenursprung $O = (0, 0, \dots, 0)^T$ zum Punkt P führt. Der Vektor \overrightarrow{OP} heißt *Ortsvektor* des Punktes P . Man nennt x_k die Koordinaten des Vektors \overrightarrow{OP} und schreibt

$$\overrightarrow{OP} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T.$$

Ein beliebiger Vektor \overrightarrow{xy} stimmt mit dem Ortsvektor des Punktes $y - x$ überein, hat also die *Koordinatendarstellung*

$$\overrightarrow{xy} = \begin{pmatrix} y_1 - x_1 \\ y_2 - x_2 \\ \vdots \\ y_n - x_n \end{pmatrix}.$$

Der Vektor $\vec{0} = (0, 0, \dots, 0)^T$ heißt Nullvektor.

Euklidischer Raum. Um Abstände und Winkel messen zu können, führen wir folgende Begriffe ein.

Definition 7.1.3. Seien $x, y \in \mathbb{R}^n$. Dann heißt

$$\|x\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$$

die *Euklidnorm* von x und

$$\langle x, y \rangle = x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots + x_n y_n$$

das *innere Produkt* (oder *Skalarprodukt*) von x und y .

Bemerkungen 7.1.4:

- (i) Andere Schreibweisen für $\langle x, y \rangle$ sind $x \cdot y$ oder gelegentlich (x, y) .
- (ii) Die Euklidnorm $\|x\|$ ist die geometrische Länge der Strecke von 0 nach x , d.h. die Länge des Ortsvektors des Punktes x ; entsprechend ist $\|x - y\|$ der Abstand zweier Punkte x und y . Ein Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ mit $\|x\| = 1$ heißt *normiert* oder *Einheitsvektor*.
- (iii) Die wichtigsten Eigenschaften der Euklidnorm sind
 - $\|x\| \geq 0$ und $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
 - $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$ für $\lambda \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n$
 - $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$ für $x, y \in \mathbb{R}^n$ (*Dreiecksungleichung*).
- (iv) Die wichtigsten Eigenschaften des Skalarproduktes sind
 - $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$
 - $\langle x, x \rangle \geq 0$, und $\langle x, x \rangle = 0$ nur für $x = 0$
 - $\langle \alpha x + \beta y, z \rangle = \alpha \langle x, z \rangle + \beta \langle y, z \rangle$,

sowie

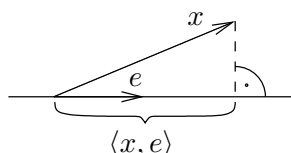
$$\langle x, y \rangle = \|x\| \|y\| \cos \varphi,$$

wobei φ der von x und y eingeschlossene Winkel ist. Folglich gilt

$$|\langle x, y \rangle| \leq \|x\| \|y\| \quad (\text{Cauchy-Schwarz'sche Ungleichung}).$$

Das Skalarprodukt hat folgende anschauliche Bedeutung:

Bildet man das Skalarprodukt zwischen $x \in \mathbb{R}^n$ und einem Einheitsvektor $e \in \mathbb{R}^n$ (also $\|e\| = 1$), so erhält man die Länge der Projektion von x auf die durch e aufgespannte Gerade bis auf das Vorzeichen. Ist der Winkel zwischen x und e größer als $\frac{\pi}{2}$ ($= 90^\circ$), so ist $\langle x, e \rangle < 0$ und $-\langle x, e \rangle$ die Länge der Projektion.



(Wichtig etwa bei Zerlegung von Kräften: $\vec{F}_e = \langle \vec{F}, \vec{e} \rangle \vec{e}$, \vec{e} Anteil von \vec{F} in Richtung \vec{e})

Gilt $\langle x, y \rangle = 0$, so heißen x und y zueinander senkrecht (*orthogonal*).

7.2 Lineare Unabhängigkeit, Teilräume, Basis und Dimension

Definition 7.2.1. Vektoren $a_1, a_2, \dots, a_m \in \mathbb{R}^n$ heißen *linear unabhängig*, falls gilt:

Aus dem Ansatz $\sum_{k=1}^m \lambda_k a_k = 0$ (mit $\lambda_k \in \mathbb{R}$) folgt stets $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_m = 0$.

Bemerkung 7.2.2. Die Bedingung sagt gerade, dass die Gleichung $\lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 + \dots + \lambda_m a_m = 0$ nach keinem der a_k aufgelöst werden kann. Also sind Vektoren a_1, \dots, a_m genau dann linear abhängig, wenn mindestens ein a_i als Linearkombination der übrigen a_j geschrieben werden kann.

Beispiele 7.2.3:

(a)

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, a_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Anschaulich: a_1, a_2, a_3 linear unabhängig, denn die a_k zeigen in Richtung der Koordinatenachsen. Zeige:

$$\lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 + \lambda_3 a_3 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0.$$

Es gilt:

$$\lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 + \lambda_3 a_3 = 0 \Rightarrow \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \lambda_2 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \lambda_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \lambda_3 \end{pmatrix} = 0$$

$\Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = 0$, also sind a_1, a_2, a_3 linear unabhängig.

(b)

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3.$$

Ansatz:

$$\begin{array}{lcl} \lambda_1 a_1 + \lambda_2 a_2 = 0 & \Rightarrow & \begin{array}{l} \lambda_1 = 0 \\ -\lambda_1 + 2\lambda_2 = 0 \\ \lambda_2 = 0 \end{array} \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = 0. \end{array}$$

$\Rightarrow a_1, a_2$ sind linear unabhängig.

(c)

$$a_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, a_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}, a_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

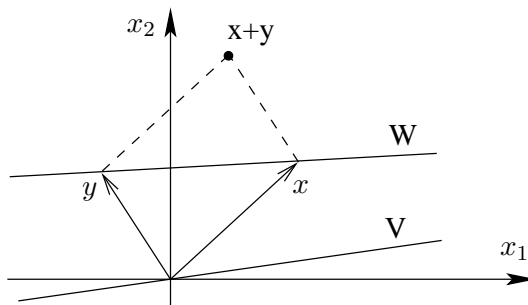
Es ist $a_3 = a_1 + a_2$, also $1 \cdot a_1 + 1 \cdot a_2 + (-1) \cdot a_3 = 0$. Daraus folgt, dass a_1, a_2, a_3 linear abhängig sind. Geometrisch: a_3 liegt in der Ebene, die von a_1, a_2 aufgespannt wird.

Definition 7.2.4. Eine Teilmenge $V \in \mathbb{R}^n$ heißt *Teilraum von \mathbb{R}^n* (oder *Unterraum*), wenn Addition und Multiplikation mit Skalaren nicht aus V herausführt, d.h.

$x, y \in V \text{ und } \lambda, \mu \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda x + \mu y \in V$

Beispiele 7.2.5:

- (a) Im \mathbb{R}^2 : Die Gerade V durch den Ursprung ist Teilraum.
Die Gerade W ist *kein* Teilraum.



- (b) $V \subset \mathbb{R}^3$ mit $V = \{(x_1, x_2, x_3) : x_1 + x_2 + x_3 = 0\}$. V ist Teilraum des \mathbb{R}^3 , denn:
Sei $x, y, \in V, \lambda, \mu \in \mathbb{R}$ und $z := \lambda x + \mu y$. Dann gilt

$$z_1 + z_2 + z_3 = \lambda(x_1 + x_2 + x_3) + \mu(y_1 + y_2 + y_3) = 0,$$

also $z \in V$.

- (c) $V = \{0\}$ und $V = \mathbb{R}^n$ sind Teilräume des \mathbb{R}^n .

Basis und Dimension.

Jedes Element $x = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$ lässt sich als Linearkombination der Vektoren $e_1 = (1, 0)$ und $e_2 = (0, 1)$ darstellen:

$$x = (x_1, 0) + (0, x_2) = x_1 e_1 + x_2 e_2.$$

Ebenso durch die Vektoren $e'_1 = (1, 1)$ und $e'_2 = (1, -1)$:

$$x = \frac{x_1 + x_2}{2} e'_1 + \frac{x_1 - x_2}{2} e'_2.$$

Sowohl $\{e_1, e_2\}$ also auch $\{e'_1, e'_2\}$ bilden deshalb eine sogenannte Basis des \mathbb{R}^2 .

Definition 7.2.6. Sei V ein Teilraum des \mathbb{R}^n . Eine Menge $\{e_1, \dots, e_m\} \subset V$ heißt *Basis von* V , wenn

- (i) e_1, \dots, e_m linear unabhängig sind, und
- (ii) jedes $v \in V$ Linearkombination der e_1, \dots, e_m ist.

Beispiele 7.2.7:

- (a) $\{(1, 0), (0, 1)\}$ ist Basis des \mathbb{R}^2 .

Allgemein ist $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ mit $e_k = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$ die Standardbasis des \mathbb{R}^n .

zu (i):

$$\lambda_1 e_1 + \dots + \lambda_n e_n = 0 \Rightarrow (\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n) = 0 \Rightarrow \lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0.$$

zu (ii):

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n \Rightarrow x = x_1 e_1 + \dots + x_n e_n$$

- (b) $\{(1, 1)\}$ ist keine Basis des \mathbb{R}^2 , denn (ii) verletzt.

- (c) $\{(1, 1), (1, -1), (1, 2)\}$ keine Basis des \mathbb{R}^2 , denn (i) verletzt:

$$(1, 2) = \frac{3}{2} (1, 1) - \frac{1}{2} (1, -1).$$

Bemerkungen 7.2.8:

- (i) $\{e_1, \dots, e_m\} \subset V$ ist genau dann eine Basis von V , wenn jedes $v \in V$ eine *eindeutige* Darstellung als Linearkombination der e_1, \dots, e_m hat.
- (ii) Jede Basis von V hat die gleiche Anzahl von Elementen.

Aufgrund der letzten Bemerkung ist folgende Definition sinnvoll:

Definition 7.2.9. Sei V ein Teilraum des \mathbb{R}^n . Ist $V \neq \{0\}$, so bezeichnet man als *Dimension von V* die Anzahl der Elemente einer Basis von V . Schreibweise: $\dim V$. Für $V = \{0\}$ setzt man $\dim V = 0$.

Beispiele 7.2.10:

- (a) $V = \{x \in \mathbb{R}^3 : x_1 + x_2 + x_3 = 0\}$. Ermittle Basis von V :

Es ist

$$x \in V \Leftrightarrow x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ -x_1 - x_2 \end{pmatrix} = x_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Also ist jedes $x \in V$ Linearkombination von $e_1 = (1, 0, -1)$ und $e_2 = (0, 1, -1)$.

Da e_1, e_2 linear unabhängig sind, ist $\{e_1, e_2\}$ eine Basis von V . Also gilt $\dim V = 2$.

- (b) $V = \mathbb{R}^n$ hat $\dim V = n$, denn die Standardbasis des \mathbb{R}^n hat n Elemente.

7.3 Lineare Abbildungen und Matrizen

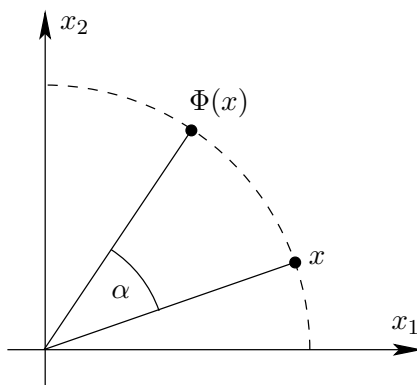
Definition 7.3.1. Eine Funktion $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ heißt *lineare Abbildung*, falls gilt:

$$\Phi(\lambda x + \mu y) = \lambda \Phi(x) + \mu \Phi(y) \quad \text{für alle } x, y \in \mathbb{R}^n, \lambda, \mu \in \mathbb{R}.$$

Bemerkung 7.3.2. $\Phi(x)$ ist ein Vektor im \mathbb{R}^m , also ist $\Phi(x) = (\Phi_1(x), \dots, \Phi_m(x))$ mit Komponenten $\Phi_i(x)$. Die Abbildung Φ ist genau dann linear, wenn alle $\Phi_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ lineare Abbildungen sind.

Beispiele 7.3.3:

- (a) „ k -te Koordinate“. $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\Phi(x) = x_k$.
- (b) „Projektion auf x_k -Achse“. $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ mit $\Phi(x) = x_k e_k$.
- (c) „Spiegelung an der Winkelhalbierenden“. $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit $\Phi(x_1, x_2) = (x_2, x_1)$.
- (d) „Drehung um Winkel α “. $\Phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2$ mit $\Phi(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} x_1 \cos \alpha - x_2 \sin \alpha \\ x_1 \sin \alpha + x_2 \cos \alpha \end{pmatrix}$



$$(e) \quad \Phi : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2 \text{ mit } \Phi(x) = \begin{pmatrix} x_1 + 2x_2 - x_3 \\ x_2 + x_3 \end{pmatrix}.$$

Jede lineare Abbildung $\Phi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ ist durch Angabe von $m \cdot n$ Koeffizienten eindeutig bestimmt. Um dies einzusehen, sei $\{e_1, \dots, e_n\}$ die Standardbasis der \mathbb{R}^n .

Dann ist $\Phi(x) = (\Phi_1(x), \dots, \Phi_m(x))$ und

$$\Phi_i(x) = \Phi_i\left(\sum_{k=1}^n x_k e_k\right) = \sum_{k=1}^n x_k \Phi_i(e_k) = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} x_k, \quad i = 1, \dots, m,$$

mit $\alpha_{ik} := \Phi_i(e_k)$ für $i = 1, \dots, m$ und $k = 1, \dots, n$.

Definition 7.3.4. *Matrizen.* Ein Schema von Elementen $\alpha_{ik} \in \mathbb{R}$ der Form

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \cdots & \cdots & \alpha_{mn} \end{pmatrix}$$

heißt $m \times n$ -*Matrix*. Die Menge aller $m \times n$ -Matrizen (mit Elementen aus \mathbb{R}) wird mit $M_{m,n}(\mathbb{R})$ oder kurz $\mathbb{R}^{m \times n}$ bezeichnet.

Schreibweise: $A = (\alpha_{ik}) \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ oder $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ mit $A = (\alpha_{ik})$. Für $m = n$ heißt A *quadratische Matrix*. $(\alpha_{i1}, \dots, \alpha_{in})$ heißt i -te Zeile von A , $\begin{pmatrix} \alpha_{1j} \\ \vdots \\ \alpha_{mj} \end{pmatrix}$ heißt j -te Spalte von A .

Beispiel 7.3.5:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ -1 & 3 & 7 \end{pmatrix} \in M_{2,3}(\mathbb{R}), \quad B = \begin{pmatrix} 4 \\ 1 \\ -2 \end{pmatrix} \in M_{3,1}(\mathbb{R}),$$

$$C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -3 \end{pmatrix} \in M_{1,3}(\mathbb{R}), \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \in M_{2,2}(\mathbb{R}).$$

Bemerkungen 7.3.6:

- (i) Zu jeder Matrix $A = (\alpha_{ik}) \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ gehört eine eindeutige Abbildung $\Phi_A : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, definiert durch

$$(\Phi_A(x))_i := \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} x_k, \quad i = 1, \dots, m.$$

- (ii) Jeder Vektor $x \in \mathbb{R}^n$ kann als Matrix mit einer Zeile bzw. einer Spalte aufgefasst werden. Im Zusammenhang mit Matrizen ist es sinnvoll, $x \in \mathbb{R}^n$ als $n \times 1$ -Matrix ($\hat{=}$ Spaltenvektor) anzusehen.
- (iii) Entsprechend der Definition 7.3.4 erklärt man die Menge $M_{m,n}(\mathbb{C})$ der $m \times n$ -Matrizen A mit komplexen Einträgen $\alpha_{ik} \in \mathbb{C}$. Ist die zugrunde liegende Zahlenmenge (\mathbb{R} oder \mathbb{C}) nicht relevant, so schreiben wir kurz $M_{m,n}$.

Definition 7.3.7 (Addition und Multiplikation mit Skalaren). Seien $A, B \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ mit $A = (\alpha_{ij}), B = (\beta_{ij})$ und $\lambda \in \mathbb{R}$ (oder \mathbb{C}). Wir definieren

$$A + B := (\alpha_{ij} + \beta_{ij}) = \begin{pmatrix} \alpha_{11} + \beta_{11} & \cdots & \alpha_{1n} + \beta_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_{m1} + \beta_{m1} & \cdots & \alpha_{mn} + \beta_{mn} \end{pmatrix}$$

$$\lambda A := (\lambda \alpha_{ij}) = \begin{pmatrix} \lambda \alpha_{11} & \cdots & \lambda \alpha_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \lambda \alpha_{m1} & \cdots & \lambda \alpha_{mn} \end{pmatrix}$$

Matrizenprodukt.

Seien $\Phi_B : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ und $\Phi_A : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^l$ lineare Abbildungen mit zugehörigen Matrizen $A = (\alpha_{ij})$ und $B = (\beta_{ik})$. Welche Matrix gehört zur Hintereinanderschaltung $\Phi_A \circ \Phi_B : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$? Es ist

$$(\Phi_A(y))_i = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} y_j \text{ und } (\Phi_B(x))_j = \sum_{k=1}^n \beta_{jk} x_k.$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} (\Phi_A(\Phi_B(x)))_i &= \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} (\Phi_B(x))_j = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \sum_{k=1}^n \beta_{jk} x_k \\ &= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n \alpha_{ij} \beta_{jk} x_k = \sum_{k=1}^n \left(\sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \beta_{jk} \right) x_k. \end{aligned}$$

Also gilt

$$(\Phi_A(\Phi_B(x)))_i = \sum_{k=1}^n \gamma_{ik} x_k \text{ mit } \gamma_{ik} := \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \beta_{jk},$$

d.h. es ist $\Phi_A \circ \Phi_B = \Phi_C$ für die Matrix $C = (\gamma_{ik})$. Das legt folgende Definition nahe:

Definition 7.3.8 (Matrizenprodukt). Sei $A = (\alpha_{ij})$ eine $l \times m$ -Matrix und $B = (\beta_{ij})$ eine $m \times n$ -Matrix. Wir definieren das *Produkt* AB als die $l \times n$ -Matrix

$$AB := (\gamma_{ik}) \text{ mit } \gamma_{ik} = \sum_{j=1}^m \alpha_{ij} \beta_{jk}, \quad i = 1, \dots, l, \quad k = 1, \dots, n.$$

Ausgeschrieben:

$$AB = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^m \alpha_{1j} \beta_{j1} & \cdots & \sum_{j=1}^m \alpha_{1j} \beta_{jn} \\ \vdots & & \vdots \\ \sum_{j=1}^m \alpha_{lj} \beta_{j1} & \cdots & \sum_{j=1}^m \alpha_{lj} \beta_{jn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma_{11} & \cdots & \gamma_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ \gamma_{l1} & \cdots & \gamma_{ln} \end{pmatrix}$$

Bemerkungen 7.3.9:

- (i) AB ist *nur dann* definiert, wenn die Anzahl der Spalten von A mit der Anzahl der Zeilen von B übereinstimmt!
- (ii) Die Berechnung von AB merkt man sich als Schema “Zeile \times Spalte”:

$$\begin{array}{ccc}
 & \begin{array}{c} k\text{-te Spalte} \\ \text{von } B \ (m \times n) \\ \downarrow \\ \beta_{1k} \\ \beta_{2k} \\ \vdots \\ \beta_{mk} \end{array} & \\
 & \downarrow & \\
 \begin{array}{c} m \times m \\ \boxed{} \end{array} & \left(\begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array} \right) & \\
 & \downarrow & \\
 \begin{array}{c} i\text{-te Zeile} \\ \text{von } A \rightarrow \\ (l \times m) \end{array} & \left(\begin{array}{c} \\ \alpha_{i1} \ \alpha_{i2} \ \cdots \ \alpha_{im} \end{array} \right) & \left(\begin{array}{c} \\ \gamma_{ik} \end{array} \right) \leftarrow \begin{array}{c} i\text{-te Zeile} \\ \text{von } AB \\ (l \times n) \end{array} \\
 & & \uparrow \\
 & k\text{-te Spalte} & \\
 & \text{von } AB &
 \end{array}$$

$$\gamma_{ik} = \alpha_{i1}\beta_{1k} + \alpha_{i2}\beta_{2k} + \dots + \alpha_{im}\beta_{mk}.$$

Beispiele 7.3.10:

(a)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & -3 \\ 2 & 1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \Rightarrow AB = \begin{pmatrix} 1 & 11 \\ -4 & 22 \end{pmatrix}$$

(b) A, B wie in (a)

$$BA = \begin{pmatrix} 0 & -3 \\ 2 & 1 \\ -1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ -2 & 0 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 0 & -12 \\ 0 & 4 & 10 \\ -9 & -2 & 13 \end{pmatrix}$$

(c) A wie in (a)

$$B = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow AB \text{ ist nicht definiert.}$$

(d)

$$C = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow CD = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad DC = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Beachte: auch für quadratische Matrizen gilt i.a. $CD \neq DC$.**Das Matrizenprodukt ist *nicht* kommutativ.****Rechenregeln**

- (i) $A(BD) = (AB)D$ (assoziativ)
- (ii) $A(B+C) = AB + AC$ (distributiv)

Dabei sei $A \in M_{n,m}, B, C \in M_{m,l}$ und $D \in M_{l,k}$, damit alle Produkte und Summen definiert sind.

Produkt „Matrix mal Vektor“: Für $A = (\alpha_{ij}) \in M_{m,n}$ und $x = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ (oder \mathbb{C}^n) wird das Produkt Ax so definiert, als wenn x eine $n \times 1$ -Matrix ist. D.h.

$$(Ax)_i = \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} x_j$$

Damit ist die Abbildung $x \rightarrow Ax$ gleich der durch A gegebenen linearen Abbildung Φ_A , d.h. $\Phi_A(x) = Ax$.

Ein „neutrales Element“ bzgl. der Matrizenmultiplikation ist die quadratische *Einheitsmatrix* $I_n \in M_{n,n}$, definiert durch

$$I_n = \begin{pmatrix} 1 & & 0 \\ & 1 & \\ & & \ddots \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{außerhalb der Diagonalen stehen Nullen}).$$

Genauer: $I_n = (\delta_{ij})$ mit dem sogenannten Kroneckersymbol $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{für } i = j \\ 0 & \text{für } i \neq j \end{cases}$

Durch Ausmultiplizieren sieht man

$$I_n A = A \quad \text{für alle } A \in M_{n,m}$$

$$B I_n = B \quad \text{für alle } B \in M_{k,n}.$$

Wir nennen eine $n \times n$ -Matrix A *invertierbar* (oder *regulär*), wenn es eine Matrix $B \in M_{n,n}$ gibt mit

$$AB = BA = I_n.$$

In diesem Fall heißt B *invers* zu A , und man schreibt A^{-1} statt B .

Bemerkung 7.3.11. Um die Inverse von $A \in M_{m,n}$ zu bestimmen, reicht es aus, eine Matrix $B \in M_{n,n}$ mit $AB = I_n$ zu finden. Dann folgt automatisch die Gleichung $BA = I_n$.

Beispiele 7.3.12:

(a)

$$A = \begin{pmatrix} 3 & -2 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix}.$$

Nachrechnen ergibt

$$AB = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I_2, \text{ also ist } A^{-1} = B.$$

(b) $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ ist *nicht* invertierbar. Annahme: es gibt eine 2×2 -Matrix $B = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ mit $AB = I_2$.

Dann folgt

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} a+c & b+d \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

und damit den Widerspruch $0 = 1$.

Bemerkung 7.3.13. Ist A eine invertierbare Matrix, und ist A^{-1} bekannt, so ist das lineare Gleichungssysteme $Ax = b$ sofort lösbar:

$$\underline{Ax = b} \Leftrightarrow (A^{-1}A)x = A^{-1}b \Leftrightarrow I_n x = A^{-1}b \Leftrightarrow \underline{x = A^{-1}b}.$$

Beispiel 7.3.14:

$$\begin{aligned} 3x_1 - 2x_2 &= 4 \\ -x_1 + x_2 &= -2 \end{aligned} \Leftrightarrow Ax = \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \end{pmatrix} \text{ mit } A \text{ aus Beispiel 1 von oben.}$$

Also ist

$$x = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2 \end{pmatrix} \text{ Lösung.}$$

Auf die Berechnung von A^{-1} gehen wir später ein. Sie muss allerdings in der Praxis nur selten durchgeführt werden (s.u.).

Ein Hauptziel dieses Paragraphen ist die Untersuchung solcher linearer Gleichungssysteme - auch wenn A nicht invertierbar ist. Dazu benötigen wir noch einige Begriffe:

Die transponierte Matrix. Sei $A = (\alpha_{ij}) \in M_{m,n}$. Die zu A transponierte Matrix entsteht aus A durch Vertauschen von Zeilen mit Spalten und wird mit A^T bezeichnet. A^T ist eine $n \times m$ -Matrix.

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \cdots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{m1} & \alpha_{m2} & \cdots & \alpha_{mn} \end{pmatrix} \Rightarrow A^T = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \cdots & \alpha_{m1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{m2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{1n} & \alpha_{2n} & \cdots & \alpha_{mn} \end{pmatrix}$$

Beispiel 7.3.15:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 3 \end{pmatrix}, \quad A^T = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 2 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Rechenregeln.

- (i) $(AB)^T = B^T A^T$ für $A \in M_{n,m}$ und $B \in M_{m,l}$
- (ii) $(A^T)^{-1} = (A^{-1})^T =: A^{-T}$ für invertierbare $A \in M_{n,n}$.

Bild und Kern einer Matrix. Sei $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$. Dann heißt

$$\begin{aligned} \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = 0\} & \quad \text{der Kern von } A, \quad \text{kurz } \ker A. \\ \{Ax \in \mathbb{R}^m : x \in \mathbb{R}^n\} & \quad \text{das Bild von } A, \quad \text{kurz } \operatorname{Im} A. \end{aligned}$$

Die Mengen $\ker A$ und $\operatorname{Im} A$ sind Teilräume des \mathbb{R}^n bzw. \mathbb{R}^m . Man bezeichnet die Dimension von $\ker A$ als *Defekt von A* und die Dimension von $\operatorname{Im} A$ als *Rang von A*, kurz $\operatorname{rg} A$.

Insbesondere der Rang von A ist wichtig zur Lösung von linearen Gleichungssystemen. Ein erster Schritt zur Berechnung von $\operatorname{rg} A$ liefert folgender Satz.

Satz 7.3.16. Sei $A \in M_{m,n}$. Dann gilt

$$\begin{aligned}\operatorname{rg} A &= \text{maximale Anzahl linear unabhängiger Spalten von } A \\ &= \text{maximale Anzahl linear unabhängiger Zeilen von } A.\end{aligned}$$

Insbesondere gilt also $\operatorname{rg} A = \operatorname{rg} A^T$.

Beispiel 7.3.17:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & 5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Die ersten zwei Zeilen sind linear unabhängig, alle drei Zeilen nicht. Also gilt $\operatorname{rg} A = 2$.

Zwischen Rang und Defekt besteht folgender Zusammenhang:

Satz 7.3.18. Sei $A \in M_{m,n}$. Dann gilt die *Dimensionsregel*:

$\dim(\ker A) + \dim(\operatorname{Im} A) = n.$

Also: Rang von A + Defekt von A = Anzahl der Spalten von A .

Im Beispiel von oben: $\dim(\ker A) = 4 - \operatorname{rg} A = 4 - 2 = 2$.

Man kann am Rang einer $n \times n$ -Matrix erkennen, ob diese invertierbar ist:

Satz 7.3.19 (Invertierbarkeitskriterien). Sei $A \in M_{n,n}$. Dann sind äquivalent:

- (i) A ist invertierbar,
- (ii) $\operatorname{rg} A = n$,
- (iii) $\ker A = \{0\}$,
- (iv) $\operatorname{Im} A = \mathbb{R}^n$,
- (v) Φ_A ist umkehrbar (also bijektiv).

7.4 Lineare Gleichungssysteme

Wir betrachten lineare Gleichungssysteme (kurz LGS) der Form

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & +a_{12}x_2+ & \cdots & +a_{1n}x_n & = & b_1 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ a_{m1}x_1 & +a_{m2}x_2+ & \cdots & +a_{mn}x_n & = & b_m \end{array}$$

Man fasst die a_{ij} zur *Koeffizientenmatrix* $A = (a_{ij})$ und die b_i zur *rechten Seite* $b = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}$

zusammen. Dann lautet das LGS in Matrixschreibweise: $Ax = b$.

Zu gegebenem A und b sind alle Lösungsvektoren $x \in \mathbb{R}^n$ gesucht. Im Fall $b \neq 0$ heißt das LGS $Ax = b$ *inhomogen*, sonst *homogen*. Zu dem LGS $Ax = b$ heißt $Ax = 0$ das zugeordnete homogene System. Schließlich heißt

$$(A|b) := \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix}$$

die *erweiterte Koeffizientenmatrix*.

Wann ist $Ax = b$ zu gegebenem A und b lösbar?

Satz 7.4.1. Sei $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$ und $b \in \mathbb{R}^m$. Dann sind äquivalent

(i) $Ax = b$ ist lösbar

(ii) $b \in \text{Im } A$

(iii) $\boxed{\text{rg } A = \text{rg}(A|b)}$

Gilt $\text{rg } A = m$, so ist $Ax = b$ für beliebiges $b \in \mathbb{R}^m$ lösbar.

Beispiel 7.4.2:

(a)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Hier ist $\text{rg } A = 1$ und $\text{rg}(A|b) = 2$, also ist $Ax = b$ nicht lösbar.

(b)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \in M_{2,3}$$

hat $\text{rg } A = 2 (=m)$, also ist $Ax = b$ für jedes $b \in \mathbb{R}^2$ lösbar.

Wie bekommt man alle Lösungen von $Ax = b$?

Satz 7.4.3. Sei $A \in M_{m,n}(\mathbb{R})$, $b \in \mathbb{R}^m$ und x_s eine spezielle Lösung von $Ax = b$. Dann ist die Lösungsmenge (=Menge aller Lösungen) von $Ax = b$ gleich

$$x_s + \ker A = \{x_s + x : Ax = 0\}.$$

Beispiel 7.4.4: Alle Lösungen von $Ax = b$ für $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, $b = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}$.

1. Schritt:

Bestimme eine spezielle Lösung x_s von $Ax = b$, hier z.B. $x_s = \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix}$.

2. Schritt:

Bestimme $\ker A$, d.h. *alle Lösungen von* $Ax = 0$.

Hier:

$$\left. \begin{array}{l} x_1 + 2x_3 = 0 \\ x_2 + x_3 = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l} x_1 = -2x_3 \\ x_2 = -x_3 \end{array}$$

Also

$$\{x : Ax = 0\} = \left\{ x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} : x_1 = -2x_3, x_2 = -x_3 \right\} = \left\{ \begin{pmatrix} -2x_3 \\ -x_3 \\ x_3 \end{pmatrix} : x_3 \in \mathbb{R} \right\}.$$

Lösungsmenge $\ker A$ hat einen Parameter (etwa x_3). Dies ist schon zuvor klar nach Satz 7.3.18, denn $\dim(\ker A) = n - \operatorname{rg} A = 3 - 2 = 1$. Bezeichnung des Parameters als x_3 ist nicht gut. Besser ist z.B.

$$\ker A = \left\{ \lambda \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} : \lambda \in \mathbb{R} \right\}.$$

3. Schritt:

Bilde $x_s + \ker A$. Hier: Lösungsmenge von $Ax = b$ ist

$$\left\{ \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 0 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} -2 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} : \lambda \in \mathbb{R} \right\}.$$

Wie berechnet man den Rang von A , eine spezielle Lösung von $Ax = b$ und schließlich alle Lösungen von $Ax = b$ systematisch?

Für die Praxis kann die Antwort auf diese Fragen auf drei Situationen aufgeteilt werden:

(a) **Das quadratische homogene Gleichungssystem $Ax = 0$, $A \in M_{n,n}$:**

(a) A ist regulär $\iff \operatorname{rg}(A) = n$:

Dann ist $x = 0$ die einzige Lösung.

(b) A ist singulär $\iff \operatorname{rg}(A) < n$:

Dann gibt es einen Lösungsraum der Dimension $\ker(A)$, siehe oben.

Auf den Fall (b) werden wir aus Zeitgründen nicht weiter eingehen. Der *triviale* Fall (a) ist im dritten Fall (s.u.) enthalten.

(b) **A ist singulär und/oder A nicht quadratisch:**

Hier wird als Ersatzproblem oft das **Problem der kleinsten Quadrate** gelöst, bei dem der „Fehler“ $Ax - b$ minimiert wird:

$$\text{Finde } x_0 \text{ mit } \|Ax_0 - b\| = \min_x \|Ax - b\|.$$

Auf diese Fragestellung gehen wir kurz in Abschnitt 7.7 ein.

(c) **A ist regulär quadratisch:**

Dann kann die eindeutige Lösung mit dem *Gauß-Algorithmus* bestimmt werden, der gleichzeitig die effizienteste Methode ist, um Inverse und Determinanten zu berechnen, siehe Abschnitt 7.6.

Der Gauß-Algorithmus kann auch so allgemein formuliert werden, dass damit die allgemeine Lösung des linearen Gleichungssystems $Ax = b$ mit $A \in M_{m,n}$ ohne Voraussetzungen an A berechnet wird. Dieses aufwändige Verfahren können wir aber hier leider nicht betrachten.

7.5 Determinanten

Das Gleichungssystem

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2$$

ist für jede rechte Seite $b = (b_1, b_2)$ lösbar, falls

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0$$

gilt. Den Ausdruck $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ bezeichnet man als Determinante der 2×2 -Matrix $A = (a_{ij})$. Schreibweise ist $\det A$ oder $|A|$, also

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} := a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

Um allgemein die Determinante einer $n \times n$ -Matrix zu definieren, benötigen wir zunächst den Begriff der *Permutation*. Unter einer Permutation der Zahlen $1, 2, \dots, n$ versteht man eine Umordnung dieser Zahlen, z.B. (für $n = 4$)

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

Jeder solchen Umordnung entspricht eine bijektive Abbildung $\varphi : \{1, 2, \dots, n\} \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$.

Im Beispiel von oben ist

$$\varphi(1) = 3, \varphi(2) = 1, \varphi(3) = 2, \varphi(4) = 4.$$

Zu gegebenem $n \in \mathbb{N}$ bezeichne S_n die Menge aller möglichen Permutationen von $1, 2, \dots, n$. Für $\varphi \in S_n$ setzen wir

$$\operatorname{sgn} \varphi = \prod_{\substack{i,j \\ i < j}} \frac{\varphi(i) - \varphi(j)}{i - j}$$

(Produkt über alle $i, j \in \{1, \dots, n\}$ für die $i < j$ gilt). $\operatorname{sgn} \varphi$ heißt *Signum von φ* .

Beispiel 7.5.1:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \text{ also } \varphi \in S_3 \text{ mit } \varphi(1) = 3, \varphi(2) = 1, \varphi(3) = 2.$$

Hier ist das Produkt über die Indizes $(i, j) = (1, 2), (1, 3), (2, 3)$ zu bilden.

$$\Rightarrow \operatorname{sgn} \varphi = \frac{\varphi(1) - \varphi(2)}{1 - 2} \cdot \frac{\varphi(1) - \varphi(3)}{1 - 3} \cdot \frac{\varphi(2) - \varphi(3)}{2 - 3} = \frac{(3 - 1) \cdot (3 - 2) \cdot (1 - 2)}{(1 - 2) \cdot (1 - 3) \cdot (2 - 3)} = 1.$$

Es gilt immer entweder $\operatorname{sgn} \varphi = 1$ oder $\operatorname{sgn} \varphi = -1$. Im ersten Fall heißt die Permutation φ *gerade*, sonst *ungerade*.

Bemerkung 7.5.2. Jede Permutation kann durch mehrfaches Austauschen von jeweils zwei Elementen erzielt werden. Für eine (un-)gerade Permutation benötigt man eine (un-)gerade Anzahl von Vertauschungen.

Definition 7.5.3 (Determinanten). Sei $A \in M_{n,n}$ mit $A = (a_{ij})$. Dann heißt

$$\sum_{\varphi \in S_n} (\operatorname{sgn} \varphi) a_{1\varphi(1)} a_{2\varphi(2)} \cdots a_{n\varphi(n)}$$

die *Determinante* von A , geschrieben als $\det A$ oder

$$\begin{vmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix}.$$

Beispiele 7.5.4:

(a) $n = 1$, $A = (a_{11})$. Hier ist $\det A = a_{11}$.

(b) $n = 2$; mögliche Permutationen: $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$ gerade $\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$ ungerade. Dies liefert

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}.$$

(c) $n = 3$; Wir notieren nur das Ergebnis:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = + a_{11}a_{22}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ - a_{13}a_{22}a_{31} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33}$$

Dies lässt sich folgendermaßen merken (*Regel von Sarrus*):

Schreibe die ersten beiden Spalten der Matrix nochmals rechts neben die Determinante. Bilde die Produkte entlang den Diagonalen von links oben nach rechts unten (+) und von rechts oben nach links unten (−):

$$\begin{array}{cccccc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{11} & a_{12} & \\ & \ddots & \swarrow & \swarrow & \swarrow & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{21} & a_{22} & \\ & \swarrow & \swarrow & \swarrow & \ddots & \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{31} & a_{32} & \\ - & - & - & + & + & + \end{array}$$

Versehe die Produkte mit dem Vorzeichen laut Skizze und addiere auf.

Beachte: Die Regel von Sarrus gilt nur für 3×3 -Matrizen!

(d) A sei eine „Dreiecksmatrix“ der Form

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Dann gilt $\boxed{\det A = a_{11} \cdot a_{22} \cdot \cdots \cdot a_{nn}}$. Insbesondere ist $\det I_n = 1$. Die konkrete *Berechnung* von $\det A$ erfolgt für $n > 3$ am zweckmäßigsten durch Anwendung des Gauß-Algorithmus, siehe Abschnitt 7.6. Es ist auch das Zurückführen auf die Berechnung kleinerer Determinanten möglich nach Satz 7.5.5. Das ist aber für große Matrizen zu aufwändig.

Satz 7.5.5 (Laplace'scher Entwicklungssatz). Sei $A = (a_{ij}) \in M_{n,n}$. Dann gilt:

$$\det A = \sum_{j=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det S_{ij} \quad (\text{Entwicklung nach der } i\text{-ten Zeile})$$

$$\det A = \sum_{i=1}^n (-1)^{i+j} a_{ij} \det S_{ij} \quad (\text{Entwicklung nach der } j\text{-ten Spalte})$$

Dabei ist S_{ij} diejenige Matrix, die aus A durch Streichung der i -ten Zeile und j -ten Spalte entsteht.

Beispiel 7.5.6:

$$\begin{vmatrix} -1 & 4 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & -2 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 3 \\ 3 & -1 & 2 & -1 \end{vmatrix}$$

Günstig ist hier die Entwicklung nach der 3. Zeile, da diese nur zwei Einträge $\neq 0$ enthält! Dies liefert

$$= (-1)^{3+1} \cdot 1 \cdot \begin{vmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \\ -1 & 2 & -1 \end{vmatrix} + (-1)^{3+4} \cdot 3 \cdot \begin{vmatrix} -1 & 4 & 2 \\ 2 & 1 & -2 \\ 3 & -1 & 2 \end{vmatrix}$$

Jetzt kann mit der Regel von Sarrus weitergerechnet werden

$$= 8 - 2 + 2 - 2 - 8 + 2 - 3 \cdot (-2 - 24 - 4 - 6 + 2 - 16) = 150.$$

Rechenregeln für Determinanten. Für $A, B \in M_{n,n}$ gelten

(a) $\det(A \cdot B) = \det A \det B$

(b) $\det A^{-1} = \frac{1}{\det A}$, falls A invertierbar ist

(c) $\det A^T = \det A$

Zur Formulierung der nachfolgenden Regeln bezeichnen wir die Spalten von $A = (a_{ij})$ mit a^1, \dots, a^n und schreiben $\det(a^1, \dots, a^n)$ für $\det A$. Es gilt

- (d) $\det(a^1, \dots, a^{i-1}, \lambda a^i, a^{i+1}, \dots, a^n) = \lambda \det(a^1, \dots, a^{i-1}, a^i, a^{i+1}, \dots, a^n)$
- (e) $\det(a^1, \dots, a^{i-1}, a^i + b, a^{i+1}, \dots, a^n) = \det(a^1, \dots, a^{i-1}, a^i, a^{i+1}, \dots, a^n) + \det(a^1, \dots, a^{i-1}, b, a^{i+1}, \dots, a^n)$
- (f) Beim Austausch zweier Spalten (oder Zeilen) von A wechselt $\det A$ das Vorzeichen.
- (g) Sind zwei Spalten (oder Zeilen) von A gleich, so ist $\det A = 0$.
- (h) Addition des λ -fachen der i -ten Spalte (Zeile) von A zur j -ten Spalte (Zeile) ändert $\det A$ nicht, wenn $i \neq j$ ist.

Die Regeln (f) und (h) werden auch bei der Lösung eines LGS mit dem Gauß-Algorithmus verwendet.

Satz 7.5.7. Sei $A \in M_{n,n}(\mathbb{R})$. Dann sind äquivalent:

- (a) $\det A \neq 0$.
- (b) A ist invertierbar.
- (c) $Ax = b$ ist für jedes $b \in \mathbb{R}^n$ eindeutig lösbar.

Bemerkung 7.5.8. Teil (c) bedeutet, dass $Ax = 0$ nur die Lösung $x = 0$ hat. Also folgt: $Ax = 0$ hat Lösungen $x \neq 0 \Leftrightarrow \det A = 0$.

Satz 7.5.9. Seien $a_1, \dots, a_n \in \mathbb{R}^n$. Dann sind äquivalent:

- (i) a_1, \dots, a_n sind linear unabhängig.
- (ii) $\det A \neq 0$, wenn A die Spaltenvektoren a_1, \dots, a_n hat.

Für kleine n kann $Ax = b$ sinnvoll mit folgender Determinanten-Regel formelmäßig gelöst werden:

Satz 7.5.10 (Cramer-Regel). Sei $A = (\alpha_{ij}) \in M_{n,n}(\mathbb{R})$ mit $\det A \neq 0$ und sei $b \in \mathbb{R}^n$. Dann ist die eindeutige Lösung von $Ax = b$ durch

$$x_i = \frac{1}{\det A} \det C_i \quad i = 1, \dots, n$$

gegeben. Dabei ist

$$C_i = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \cdots & \alpha_{1,i-1} & b_1 & \alpha_{1,i+1} & \cdots & \alpha_{1,n} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{n1} & \cdots & \alpha_{n,i-1} & b_n & \alpha_{n,i+1} & \cdots & \alpha_{n,n} \end{pmatrix},$$

d.h. die i -te Spalte von A wird durch b ersetzt.

Bemerkungen 7.5.11:

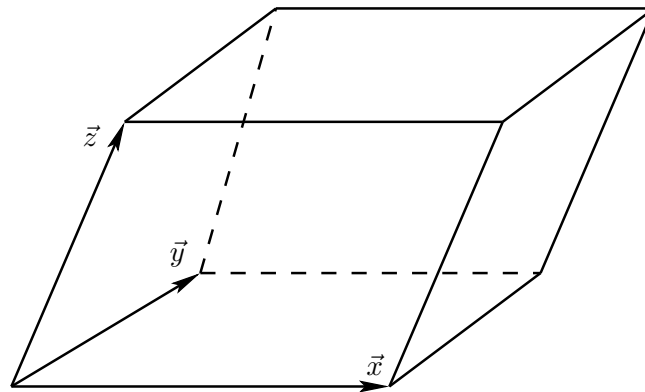
- (i) Im Spezialfall $n = 3$ kann die Determinante als Merkregel für das *Vektorprodukt* (auch äußeres Produkt) $x \times y$ für $x, y \in \mathbb{R}^3$ formal verwendet werden. Die Einheitsvektoren in Richtung der Koordinatenachsen seien e_1, e_2, e_3 . Dann gilt:

$$x \times y = \begin{vmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ y_1 & y_2 & y_3 \end{vmatrix} = e_1 \cdot \begin{vmatrix} x_2 & x_3 \\ y_2 & y_3 \end{vmatrix} - e_2 \begin{vmatrix} x_1 & x_3 \\ y_1 & y_3 \end{vmatrix} + e_3 \begin{vmatrix} x_1 & x_2 \\ y_1 & y_2 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 y_3 - x_3 y_2 \\ x_3 y_1 - x_1 y_3 \\ x_1 y_2 - x_2 y_1 \end{pmatrix}$$

- (ii) Zur Berechnung des *Spatproduktes* (d.h. $\langle x \times y, z \rangle$). Es ist

$$\langle x \times y, z \rangle = \begin{vmatrix} x_1 & y_1 & z_1 \\ x_2 & y_2 & z_2 \\ x_3 & y_3 & z_3 \end{vmatrix} \text{ für } x, y, z \in \mathbb{R}^3.$$

$|\langle x \times y, z \rangle|$ ist das Volumen des von x, y, z aufgespannten *Spates*.



7.6 Der Gauß-Algorithmus für reguläre Gleichungssysteme

Wir wollen jetzt das lineare Gleichungssystem

$$Ax = b$$

unter folgender Voraussetzung lösen:

Voraussetzung 7.6.1. Die Matrix A sei quadratisch und regulär $\iff \det(A) \neq 0$.

Der Gauß-Algorithmus basiert auf den sogenannten *elementaren Umformungen*:

- (a) Vertauschen zweier Zeilen (oder Spalten),
- (b) Multiplizieren einer Zeile (oder Spalte) mit $\lambda \neq 0$,
- (c) Addition des λ -fachen der i -ten Zeile (oder Spalte) zur j -ten Zeile (oder Spalte), wobei $i \neq j$ ist.

Satz 7.6.2. Die elementaren Umformungen entsprechen der Multiplikation mit invertierbaren Matrizen und lassen den Rang der Matrix unverändert.

Z.B. bewirkt die Multiplikation von links (rechts) mit der Matrix

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

das Vertauschen der Zeilen (Spalten) 2 und 4.

Die elementaren *Zeilenumformungen* ergeben sich alle durch *Multiplikation* mit invertierbaren Matrizen *von links*.

Idee des Gauß-Algorithmus: Starte mit der erweiterten Matrix $(A|b)$. Verwende elementare Zeilenumformungen, um $(A|b)$ in eine „möglichst einfache“ Matrix $(\tilde{A}|\tilde{b})$ umzuformen. Nach Satz 7.6.2 gilt dann: $Ax = b$ und $\tilde{A}x = \tilde{b}$ haben dieselben Lösungen!

Denn: Es ist $(\tilde{A}|\tilde{b}) = R(A|b)$ mit einer invertierbaren Matrix R , also gilt $Ax = b \Leftrightarrow R Ax = R b \Leftrightarrow \tilde{A}x = \tilde{b}$. Außerdem ist $\text{rg } A = \text{rg } \tilde{A} = \text{rg}(A|b) = \text{rg}(\tilde{A}|\tilde{b})$!

- **Wichtig:** Elimination liefert Dreieckszerlegung!
- **Wichtig:** Zeilenvertauschungen für Existenz der Zerlegung notwendig!

Das Gauß'sche Eliminationsverfahren bewirkt eine Faktorisierung der Matrix A in zwei Dreiecksmatrizen:

$$A = LR = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & r_{23} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & r_{33} & \dots & r_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & r_{nn} \end{pmatrix}. \quad (7.2)$$

Dabei ist L eine linke untere, R eine rechte obere Dreiecksmatrix. Leider existiert eine solche Zerlegung nicht für jede reguläre Matrix A .

Beispiel 7.6.3: Sei $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$. A ist regulär, $\det(A) = -1$. Trotzdem gibt es keine Dreiecksmatrizen L und R , so dass (7.2) gilt. Denn es müsste ja $l_{11}r_{11} = a_{11} = 0$ sein, also $l_{11} = 0$ oder $r_{11} = 0$. Dann wäre aber L oder R singulär und damit auch das Produkt A , was der Regularität von A widerspricht.

Nun ändert sich aber an dem Gleichungssystem nichts, wenn man die Gleichungen umnummeriert oder – auf A und b bezogen – eine Zeilenvertauschung durchführt. Dies ist auch aus Stabilitätsgründen sinnvoll. Mathematisch ergibt das eine Zerlegung

$$PA = LR,$$

wobei P eine *Permutationsmatrix* ist.

Definition 7.6.4. Eine *Permutationsmatrix* ist eine Matrix P , die in jeder Zeile und in jeder Spalte genau eine 1 und sonst nur Nullen enthält, also

$$p_{i\alpha_i} = 1, \quad p_{ij} = 0 \quad \text{für } j \neq \alpha_i,$$

wobei $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ eine Permutation von $(1, 2, \dots, n)$ ist.

Beispiel 7.6.5: Sei $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Dann ist in Beispiel 7.6.3 $PA = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, und für diese Matrix existiert natürlich eine LR -Zerlegung: Es ist einfach $L = I$ (die Einheitsmatrix) und $R = PA$.

Satz 7.6.6. Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine reguläre Matrix. Dann gibt es immer eine Permutationsmatrix P , eine linke untere Dreiecksmatrix L und eine rechte obere Dreiecksmatrix R , so dass $PA = LR$.

7.6.1 Beispielhafte Durchführung (nach Schwarz: *Numerische Mathematik*)

In diesem Unterabschnitt soll unter der Voraussetzung, dass eine LR -Zerlegung ohne Zeilenvertauschung existiert, der Grund-Algorithmus für die Ordnung $n = 4$ erklärt werden.

Zur Vereinfachung der Schreibweise und im Hinblick auf die praktische Durchführung auf einem Rechner benutzen wir für das zu lösende Gleichungssystem $Ax = b$ eine schematische Darstellung, die im konkreten Fall $n = 4$ die folgende Form besitzt:

a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	b_1
a_{21}	a_{22}	a_{23}	a_{24}	b_2
a_{31}	a_{32}	a_{33}	a_{34}	b_3
a_{41}	a_{42}	a_{43}	a_{44}	b_4

Unter der Annahme $a_{11} \neq 0$ subtrahieren wir von den i -ten Zeilen mit $i \geq 2$ das (a_{i1}/a_{11}) -fache der ersten Zeile und erhalten

a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	b_1
0	$a_{22}^{(1)}$	$a_{23}^{(1)}$	$a_{24}^{(1)}$	$b_2^{(1)}$
0	$a_{32}^{(1)}$	$a_{33}^{(1)}$	$a_{34}^{(1)}$	$b_3^{(1)}$
0	$a_{42}^{(1)}$	$a_{43}^{(1)}$	$a_{44}^{(1)}$	$b_4^{(1)}$

(7.3)

Mit den Quotienten

$$l_{i1} = a_{i1}/a_{11}, \quad (i = 2, 3, \dots, n)$$

sind die Elemente in (7.3) gegeben durch

$$a_{ik}^{(1)} = a_{ik} - l_{i1}a_{1k}, \quad (i, k = 2, 3, \dots, n)$$

$$b_i^{(1)} = b_i - l_{i1}b_1, \quad (i = 2, 3, \dots, n).$$

Das Schema (7.3) entspricht einem zu $Ax = b$ äquivalenten Gleichungssystem. Die erste Gleichung enthält als einzige Gleichung die Unbekannte x_1 , die sich somit durch die übrigen Unbekannten ausdrücken lässt:

$$x_1 = \left(b_1 - \sum_{k=2}^n a_{1k} x_k \right) / a_{11}. \quad (7.4)$$

Weiter enthält (7.3) im allgemeinen Fall ein reduziertes System von $n - 1$ Gleichungen für die $n - 1$ Unbekannten x_2, x_3, \dots, x_n . Der Übergang von $Ax = b$ zu (7.3) entspricht somit einem *Eliminationsschritt*, mit welchem die Auflösung des gegebenen Systems in n Unbekannten auf die Lösung eines Systems in $n - 1$ Unbekannten zurückgeführt ist. Wir werden dieses reduzierte System analog weiterbehandeln, wobei die erste Zeile in (7.3) unverändert bleibt. Man bezeichnet sie deshalb als erste Endgleichung, und a_{11} , um welches sich der beschriebene Eliminationsschritt gewissermaßen dreht, als *Pivotelement*.

Unter der weiteren Annahme $a_{22}^{(1)} \neq 0$ ergibt sich aus (7.3) als Resultat eines zweiten Eliminationsschrittes

x_1	x_2	x_3	x_4	1	
a_{11}	a_{12}	a_{13}	a_{14}	b_1	
0	$a_{22}^{(1)}$	$a_{23}^{(1)}$	$a_{24}^{(1)}$	$b_2^{(1)}$	
0	0	$a_{33}^{(2)}$	$a_{34}^{(2)}$	$b_3^{(2)}$	
0	0	$a_{43}^{(2)}$	$a_{44}^{(2)}$	$b_4^{(2)}$	

(7.5)

Mit den Hilfsgrößen

$$l_{i2} = a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}, \quad (i = 3, 4, \dots, n)$$

lauten die neuen Elemente in (7.5)

$$a_{ik}^{(2)} = a_{ik}^{(1)} - l_{i2} a_{2k}^{(1)}, \quad (i, k = 3, 4, \dots, n)$$

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - l_{i2} b_2^{(1)}, \quad (i = 3, 4, \dots, n).$$

Das Schema (7.5) enthält die zweite Endgleichung für x_2

$$x_2 = \left(b_2^{(1)} - \sum_{k=3}^n a_{2k}^{(1)} x_k \right) / a_{22}^{(1)}.$$

Die konsequente Fortsetzung der Eliminationsschritte führt nach $n - 1$ Schritten zu einem Schema, welches lauter Endgleichungen enthält. Um die Koeffizienten der Endgleichungen einheitlich zu bezeichnen, definieren wir

$$a_{ik}^{(0)} := a_{ik}, \quad (i, k = 1, 2, \dots, n) \text{ und } b_i^{(0)} := b_i, \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

$$\left. \begin{aligned} r_{ik} &:= a_{ik}^{(i-1)}, & (k = i, i+1, \dots, n) \\ c_i &:= b_i^{(i-1)} \end{aligned} \right\} (i = 1, 2, \dots, n).$$

Damit lautet das Schema der Endgleichungen

r_{11}	r_{12}	r_{13}	r_{14}	c_1	
0	r_{22}	r_{23}	r_{24}	c_2	
0	0	r_{33}	r_{34}	c_3	
0	0	0	r_{44}	c_4	

(7.6)

Aus (7.6) lassen sich die Unbekannten allgemein in der Reihenfolge $x_n, x_{n-1}, \dots, x_2, x_1$ gemäß der Rechenvorschrift

$$x_i = \left(c_i - \sum_{k=i+1}^n r_{ik} x_k \right) / r_{ii}, \quad (i = n, n-1, \dots, 2, 1) \quad (7.7)$$

berechnen. Man nennt den durch (7.7) beschriebenen Prozess die *Rücksubstitution* oder das *Rückwärtseinsetzen*.

Beispiel 7.6.7: Zu lösen sei das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} 2x_1 + 3x_2 - 5x_3 &= -10 \\ 4x_1 + 8x_2 - 3x_3 &= -19 \\ -6x_1 + x_2 + 4x_3 &= -11 \end{aligned}$$

Der Gauß-Algorithmus liefert in zwei Eliminationsschritten

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & -5 & -10 \\ 4 & 8 & -3 & -19 \\ -6 & 1 & 4 & -11 \end{array} \quad \begin{array}{l} l_{i1} \\ - \\ 2 \\ -3 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 10 & -11 & -41 \end{array} \quad \begin{array}{l} l_{i2} \\ - \\ - \\ 5 \end{array}$$

$$\begin{array}{ccc|c} 2 & 3 & -5 & -10 \\ 0 & 2 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & -46 & -46 \end{array}$$

Rücksubstitution ergibt

$$\begin{aligned} x_3 &= 1, \\ x_2 &= (1 - 7)/2 = -3, \\ x_1 &= (-10 + 9 + 5)/2 = 2. \end{aligned}$$

7.6.2 Mehrere rechte Seiten. Matrixinversion

Die Tatsache, dass der Gauß-Algorithmus eine Dreieckszerlegung beinhaltet, kann man sich zu Nutze machen, wenn mehrere Gleichungssysteme mit derselben Koeffizientenmatrix zu lösen sind. Der Gauß-Algorithmus kann folgendermaßen geschrieben werden:

- | | | |
|-------|-----------|--------------------------------------|
| (i) | $PA = LR$ | (Zerlegung von PA) |
| (ii) | $Lc = Pb$ | (Vorwärtssubstitution: liefert c) |
| (iii) | $Rx = c$ | (Rücksubstitution: liefert x) |

Liegt die Zerlegung $PA = LR$ einmal vor, dann genügen zum Lösen eines zweiten und weiterer Gleichungssysteme der Form $Ax = b_2$ die Schritte (ii) und (iii) (mit b_2 statt b), die weit weniger aufwändig sind als die Zerlegung (i).

Ein spezielles Problem dieser Art ist die *Matrixinversion*:

Gegeben sei eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Gesucht ist eine Matrix $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $AX = I_n$.

Die Spalten $x_i \in \mathbb{R}^n$ der Matrix X kann man durch Lösen der Gleichungssysteme

$$Ax_i = e_i \quad i = 1, \dots, n \quad (7.8)$$

finden. Man muss also n Gleichungssysteme mit derselben Koeffizientenmatrix A lösen und dann die Inverse $X = A^{-1}$ aus ihren Spalten x_i zusammensetzen. Das ist das einfachste und stabilste Verfahren zur Matrixinversion.

7.6.3 Algorithmus: Berechnung von $\det A$

Es ist

$$\det(PA) = \det(P) \det(A)$$

$$\det(P) = (-1)^k, \text{ wenn } k \text{ die Anzahl der Vertauschungen ist.}$$

$$\det(PA) = \det(LR) = \det(L) \det(R) = r_{11} r_{22} \cdots r_{n,n}$$

$$\Rightarrow \det A = (-1)^k r_{11} r_{22} \cdots r_{n,n} \quad (7.9)$$

Der Gauß-Algorithmus liefert also mit wenigen zusätzlichen Rechenoperationen die Determinante der Matrix A . Aber auch ohne die Lösung eines linearen Gleichungssystems ist der Gauß-Algorithmus die am wenigsten aufwändige Methode, um die Determinante einer Matrix zu berechnen. Er benötigt eine zu n^3 proportionale Zahl von elementaren Rechenoperationen, während die Berechnung nach dem Laplace'schen Entwicklungssatz (Satz 7.5.5) eine zu $n!$ proportionale Anzahl benötigt.

7.7 Singuläre lineare Gleichungssysteme und die Methode der kleinsten Quadrate

7.7.1 Problemstellung

- **Singuläre Systeme**

$$Ax = b \quad \text{mit} \quad A \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad \text{und} \quad \operatorname{rg} A < n.$$

Hier kann es keine oder unendlich viele Lösungen geben, siehe Abschnitt 7.6.

- **Rechteckige Systeme**, also

$$Ax = b \quad \text{mit} \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m \quad \text{und dem gesuchten } x \in \mathbb{R}^n.$$

Insbesondere können die Gleichungssysteme unter- oder überbestimmt sein; in diesen Fällen existieren unendlich viele oder gar keine Lösungen.

Ersatzproblem: Das Problem der kleinsten Quadrate:

$$\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min_x$$

Dieses Problem hat immer *mindestens eine* Lösung. Unter diesen, evtl. vielen Lösungen gibt es *genau eine* Lösung mit minimaler euklidischer Norm; diese Auswahl einer eindeutigen Lösung ist bei rechteckigen singulären Gleichungssystemen üblich.

Definition 7.7.1. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$.

- (a) *Lösung kleinster Quadrate von $Ax = b$* oder lss (least squares solution) heißt jeder Vektor $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$, für den gilt

$$\|A\tilde{x} - b\| = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|. \quad (7.10)$$

- (b) *Minimale Lösung kleinster Quadrate von $Ax = b$* heißt die spezielle Lösung \hat{x} von (7.10), für die

$$\|\hat{x}\| = \min_{\tilde{x}} \|\tilde{x}\|.$$

Satz 7.7.2. Sei $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ eine lss zu $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann ist \tilde{x} auch Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A^T Ax = A^T b. \quad (7.11)$$

Sie ist eindeutig, wenn $\text{Rang}(A) = n \leq m$ ist.

Das System der Gleichungen (7.11) nennt man auch Normalgleichungssystem (NGS). Die Matrix $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist quadratisch, symmetrisch und positiv semidefinit. Sie ist genau dann positivdefinit, wenn $\text{rg } A = n$. Genau dann gibt es also eine eindeutige lss. Trotzdem sollte man das Problem der kleinsten Quadrate nur in Ausnahmefällen über das NGS lösen, da dieser Weg numerisch instabil sein kann.

Der stabilste Lösungsweg des Problems der kleinsten Quadrate ist der über eine Singulärwertzerlegung (SVD oder SWZ).

Ist $m \geq n$ und $\text{rg } A = n$, also $A^T A$ positiv definit, so ist als Lösungsweg auch eine *QR*-Zerlegung von A sinnvoll, wobei Q eine orthogonale und R eine reguläre obere Dreiecksmatrix ist.

Auf beide Zerlegungen wollen wir nicht weiter eingehen, weisen hier nur auf ihre Verwendung in allen großen Software-Bibliotheken hin.

7.7.2 Beispiel

Für die Methode der kleinsten Quadrate gibt es eine große Zahl von Anwendungen, z.B. in dem Abschnitt "Ausgleichsrechnung", der Anpassung beobachteter Werte an eine Funktionsform. Hier sind mit Hilfe einer großen Zahl von Beobachtungen einige wenige Funktionsparameter zu bestimmen. Wir wollen aus diesem Bereich ein praktisches Beispiel ansehen, das wir *Magid, A.R.: Applied Matrix Models* entnommen haben.

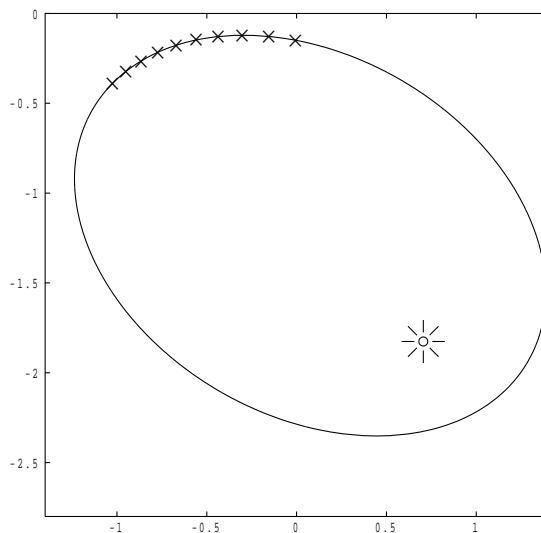
Ein neu entdeckter Himmelskörper, der sich auf einer Umlaufbahn um die Sonne bewegt, wurde an 10 Positionen beobachtet. Die kartesischen Koordinaten (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, 10$, dieser Positionen, dargestellt in einem angepassten Koordinatensystem in der Bahnebene, sind in der folgenden Tabelle wiedergegeben:

Beobachtung Nr.	x_i	y_i
1	-1.024940	-0.389269
2	-0.949898	-0.322894
3	-0.866114	-0.265256
4	-0.773392	-0.216557
5	-0.671372	-0.177152
6	-0.559524	-0.147582
7	-0.437067	-0.128618
8	-0.302909	-0.121353
9	-0.155493	-0.127348
10	-0.007464	-0.148885

Die Bahn des Himmelskörpers ist eine Ellipse mit der Sonne in einem der beiden Brennpunkte: $x^2 = ay^2 + bxy + cx + dy + e$. Setzen wir in diese Darstellung die beobachteten Positionen ein, so bekommen wir 10 lineare Gleichungen für die 5 unbekannten Koeffizienten a, b, c, d, e , die in Matrix-Form folgendermaßen aussehen:

$$\begin{pmatrix} y_1^2 & x_1 y_1 & x_1 & y_1 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_{10}^2 & x_{10} y_{10} & x_{10} & y_{10} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \\ e \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1^2 \\ \vdots \\ x_{10}^2 \end{pmatrix}.$$

Dieses System von 10 Gleichungen mit 5 Unbekannten wurde mit der Methode der kleinsten Quadrate gelöst. Die durch diese Lösung definierte Ellipse ist in der folgenden Zeichnung zu sehen. Die Kreuze kennzeichnen die gegebenen Datenpunkte.



**Bahn eines Himmelskörpers:
An 10 Punkte angepasste Ellipse**

Kapitel 8

Gewöhnliche Differentialgleichungen

8.1 Erste Beispiele und Begriffe

Beispiel 8.1.1: Natürliches Wachstum; vgl. Abschnitt 2.2.3. Eine Population bestehe zur Zeit t aus $N(t)$ Individuen. Die Population habe konstante Geburtsrate und Sterberate:

β = Anzahl Geburten pro Individuum und Zeiteinheit

δ = Anzahl Todesfälle pro Individuum und Zeiteinheit.

Also ist in einem Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$

die Anzahl der Geburten $= \beta N(t) \Delta t$,

die Anzahl der Todesfälle $= \delta N(t) \Delta t$.

Damit folgt

$$N(t + \Delta t) = N(t) + \beta N(t) \Delta t - \delta N(t) \Delta t$$

$$\Leftrightarrow \frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} = (\beta - \delta) N(t)$$

Diese Gleichung ist nur näherungsweise gültig, weil bei der Berechnung der Anzahl von Geburten bzw. Todesfällen im Zeitintervall $[t, t + \Delta t]$ für die Anzahl N der Individuen der konstante Wert $N(t)$ verwendet wurde. Tatsächlich wird N im Intervall $[t, t + \Delta t]$ variieren. Die Näherung wird umso genauer, je kleiner Δt ist. Wir lassen deshalb Δt gegen Null gehen und erhalten

$$N'(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{N(t + \Delta t) - N(t)}{\Delta t} = (\beta - \delta) N(t)$$

Beachte: Um den Grenzprozess $\Delta t \rightarrow 0$ durchführen zu können, muss die Funktion $N(t)$ differenzierbar, also insbesondere stetig sein.

Dies erscheint zunächst eine unrealistische Idealisierung zu sein; da $N(t)$ nur diskrete Werte aus \mathbb{N}_0 annimmt und somit unstetig ist (außer im uninteressanten Fall $N(t) \equiv \text{const}$). Dennoch ist diese Idealisierung sinnvoll, wenn die Population aus sehr vielen Individuen besteht. In diesem Fall entspricht eine Änderung der Anzahl um Eins einer sehr kleinen relativen Änderung von $N(t)$. Betrachtet man z.B. die Population einer gewissen chemischen Spezies (Molekülsorte), so wird N typischerweise im Bereich $10^{20} \cdots 10^{24}$ liegen. Die geringe relative Änderung, wenn ein Molekül entsteht oder abreagiert, wird durch die molare Konzentration deutlich: diese ändert sich dann (in einem Liter) um etwa $1.6 \cdot 10^{-24}$ mol/L.

Fazit: Für große Populationen kann die Anzahl der Individuen mit kleinem (relativem) Fehler durch eine stetige Funktion $N(t)$ beschrieben werden. Unter der zusätzlichen Annahme, dass $N(t)$ auch differenzierbar ist, ergibt sich das *mathematische Modell*

$$N'(t) = (\beta - \delta) N(t)$$

zur Beschreibung des Wachstums dieser Population. In dieser Gleichung tritt eine (unbekannte) Funktion und deren Ableitung auf. Solche Gleichungen heißen *Differentialgleichungen* (kurz DGLen), wobei auch höhere Ableitungen der „gesuchten“ Funktion auftreten können. Da in der Modellgleichung nur die erste Ableitung vorkommt, spricht man von einer DGL 1. Ordnung. Allgemein versteht man unter der *Ordnung einer DGL* den Grad der höchsten Ableitung. Zum Beispiel ist

$$y'''(t) - 2y'(t) + y(t)^4 = 0$$

eine DGL 3. Ordnung. Das Wachstumsmodell von oben ist eine DGL der Form

$$y'(t) = k y(t) \quad \text{mit } k \in \mathbb{R} \text{ konstant .}$$

Diese wird auch natürliche Wachstumsgleichung genannt. Nach Beispiel 5.3.4 (b) sind alle Lösungen dieser DGL durch die Funktionen

$$y(t) = c e^{kt} \quad \text{mit beliebigem } c \in \mathbb{R}$$

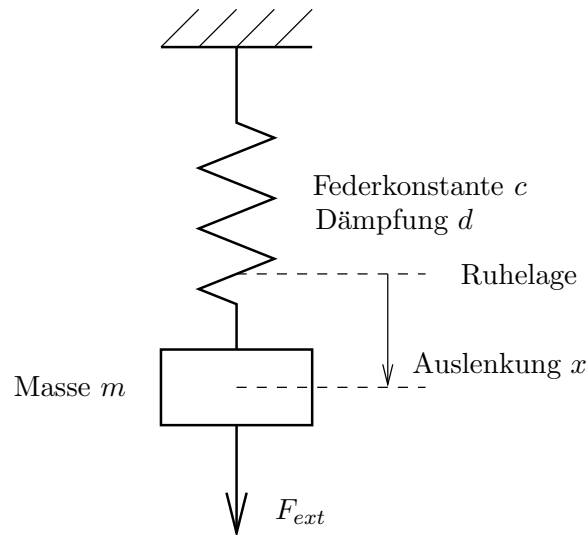
gegeben. Die Lösung ist also nur bis auf eine Konstante bestimmt; man spricht deshalb von der allgemeinen Lösung der DGL. Schreibt man zusätzlich den Wert der Lösung zu einem bestimmten (Zeit-)Punkt t_0 durch Vorgabe eines *Anfangswertes* y_0 vor, so ist die Lösung eindeutig bestimmt:

$y(t) = y_0 e^{k(t-t_0)}$ ist die einzige Lösung des *Anfangswertproblems* (kurz AWP)

$$y'(t) = k y(t), \quad y(t_0) = y_0.$$

Beispiele 8.1.2: *Schwingungsgleichung:*

(a) Federpendel:



Kräftebilanz liefert¹:

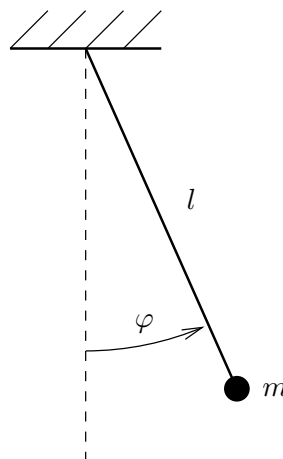
$$\begin{aligned} m \ddot{x}(t) &= -c x(t) \\ \text{mit geschw. proport. Dämpfung} \quad m \ddot{x}(t) &= -c x(t) - d \dot{x}(t) \\ \text{mit zusätzl. äußerer Kraft} \quad m \ddot{x}(t) &= -c x(t) - d \dot{x}(t) + F_{ext}(t) \end{aligned}$$

Man erhält eine DGL vom Typ

$$y''(t) + a y'(t) + b y(t) = f(t).$$

Diese DGL ist von 2. Ordnung und ist *linear*, d.h. y, y' und y'' treten ausschließlich als Linearkombination auf (also keine Terme wie $y(t)^2, y(t)y'(t)$, etc.). Analog zu linearen Gleichungssystemen heißt eine solche lineare DGL *homogen*, falls $f(t) \equiv 0$ gilt, sonst *inhomogen*.

(b) Fadenpendel:



Kräftebilanz liefert $\ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{l} \sin \varphi(t) = 0$. Dies ist eine *nichtlineare* DGL 2. Ordnung.

¹Punkte symbolisieren Ableitungen nach der Zeit t , also $\dot{x}(t) = \frac{dx}{dt}$, $\ddot{x}(t) = \frac{d^2x}{dt^2}$.

Man kann zeigen, dass die zugehörigen AWPe (mit Vorgaben $\varphi(0) = \varphi_0, \dot{\varphi}(0) = \varphi_1$) eine eindeutige Lösung besitzen - eine formelmäßige Berechnung der Lösung ist aber nicht möglich.

Beispiele 8.1.3: Einige typische DGLen der Reaktionskinetik

- (a) $c'_A(t) = -k c_A(t)$ „chemische Reaktion 1. Ordnung“

Hier bezeichnet c_A die Konzentration einer chemischen Spezies A . Diese DGL beschreibt z.B. den Konzentrationsverlauf bei einer Zerfallsreaktion $A \xrightarrow{k} B + C$ oder einer Isomerisierung $A \xrightarrow{k} B$. Dabei ist $k > 0$ die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante.

- (b) $c'_A(t) = -k c_A(t)^2$ „chemische Reaktion 2. Ordnung“

Tritt z.B. bei elementaren (also nicht aus weiteren Einzelreaktionen zusammengesetzten) Reaktionen der Form $2A \xrightarrow{k} B + C$ auf. In diesem Fall ist $k = 2k_1$, da in jedem Reaktionsschritt 2 Moleküle A abreagieren.

- (c) Oft hängt die Änderungsrate einer Konzentration auch von den Konzentrationen anderer beteiligter Spezies ab, so dass mehrere gekoppelte DGLen auftreten. Beispielsweise ergibt sich für die Elementarreaktion $A + B \xrightarrow{k} P$ das (nichtlineare!) *Differentialgleichungssystem*

$$c'_A(t) = -k c_A(t) c_B(t),$$

$$c'_B(t) = -k c_A(t) c_B(t),$$

$$c'_P(t) = k c_A(t) c_B(t).$$

- (d) Für eine Folgereaktion $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$ erhält man das DGL-System

$$c'_A(t) = -k_1 c_A(t),$$

$$c'_B(t) = k_1 c_A(t) - k_2 c_B(t),$$

$$c'_C(t) = k_2 c_B(t).$$

Dies ist ein *lineares* DGL-System 1. Ordnung. Fasst man die Konzentrationen zu dem

Vektor $y(t) = \begin{pmatrix} c_A(t) \\ c_B(t) \\ c_C(t) \end{pmatrix}$ zusammen, so lautet dieses System in Matrixschreibweise:

$$y'(t) = A y(t) \quad \text{mit } A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

8.2 DGLen mit getrennten Variablen

Eine DGL 1. Ordnung der Form

$$\boxed{y'(t) = g(t) h(y(t))} \quad \text{kurz } y' = g(t)h(y)$$

heißt *Differentialgleichung mit getrennten Variablen*.

Beispiel 8.2.1:

$$\begin{aligned} y' &= -ky^2 && (\text{hier: } g(t) = -k, h(y) = y^2) \\ y' &= e^y \sin(t) && (\text{hier: } g(t) = \sin(t), h(y) = e^y) \\ y' &= y^2 + t^2 && \text{hat keine getrennten Variablen.} \end{aligned}$$

Wie der Name andeutet, lassen sich die Variablen t und y trennen:

$$\frac{y'}{h(y)} = g(t) \quad \text{falls } h(y) \neq 0.$$

Unbestimmte Integration bzgl. t und Anwendung der Substitutionsregel liefert:

$$\int \frac{y'(t)}{h(y(t))} dt = \boxed{\int \frac{dy}{h(y)} = \int g(t) dt}$$

Berechnung dieser unbestimmten Integrale (mit Integrationskonstante) und Auflösen nach y ergibt alle Lösungen $y(t)$ für die $h(y(t)) \neq 0$ gilt. Der Spezialfall $h(y(t)) = 0$ muss gesondert behandelt werden.

Beispiele 8.2.2:

(a) $y'(t) = k y(t)$

$$\begin{aligned} \text{Für } y(t) \neq 0: \int \frac{dy}{y} &= \int k dt \quad \Rightarrow \quad \ln |y| = kt + c_1 \\ \Rightarrow |y| &= e^{kt+c_1} \quad \Rightarrow \quad y(t) = e^{c_1} e^{kt} \text{ oder } y(t) = -e^{c_1} e^{kt}. \end{aligned}$$

Beide Fälle lassen sich zusammenfassen: $y(t) = c e^{kt}$ mit $c \neq 0$.

Offensichtlich ist aber $y(t) \equiv 0$ auch eine Lösung.

Fazit: $y(t) = c e^{kt}$ mit $c \in \mathbb{R}$ beliebig; dies sind alle Lösungen von $y' = ky$.

(b) AWP: $y'(t) = -k y(t)^2$, $y(0) = y_0$ mit Anfangswert $y_0 > 0$. Für $y(t) \neq 0$:

$$\int \frac{dy}{y^2} = - \int k dt \quad \Rightarrow \quad -\frac{1}{y} = -kt + c, \text{ mit } c \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad y(t) = \frac{1}{kt - c}.$$

Bestimmung von c aufgrund der Anfangsbedingung:

$$y(0) = \frac{1}{-c} \stackrel{!}{=} y_0 \quad \Rightarrow \quad c = -\frac{1}{y_0}$$

Fazit: $y(t) = \frac{1}{\frac{1}{y_0} + kt}$ ist die Lösung des AWP.

(c) Elementarreaktion $A + B \rightarrow P$.

Für Anwendungen typische Anfangswerte sind $c_A(0) = a$, $c_B(0) = b$, $c_P(0) = 0$, d.h. zu Beginn der Reaktion liegt noch kein Produkt vor; damit eine Reaktion stattfindet muss $a, b > 0$ gelten. Gesucht ist die Produktkonzentration $c_P(t)$. Das gesamte DGL-System lautet

$$\begin{aligned} c'_A &= -k c_A c_B, & c_A(0) &= a \\ c'_B &= -k c_A c_B, & c_B(0) &= b \\ c'_P &= k c_A c_B, & c_P(0) &= 0. \end{aligned}$$

Direkt lässt sich das volle System nicht lösen. Andererseits wäre es ausreichend die letzte Gleichung zu lösen. Dies ist getrennt nur dann möglich, wenn man c_A, c_B durch c_P ausdrücken kann.

Anschaulich: Wenn (zur Zeit $t \geq 0$) N Moleküle P entstanden sind, so sind dafür je N Moleküle von A und B verbraucht worden. Für die Konzentrationen sollte also gelten:

$$\begin{aligned} c_A(t) &= a - c_P(t), & c_B(t) &= b - c_P(t) & \text{für } t \geq 0 \\ \Leftrightarrow c_A(t) + c_P(t) &= a, & c_B(t) + c_P(t) &= b & \text{für } t \geq 0. \end{aligned}$$

Diese Vermutung ist richtig, denn

$$(c_A(t) + c_P(t))' = c_A'(t) + c_P'(t) = -k c_A(t) c_B(t) + k c_A(t) c_B(t) = 0$$

$\Rightarrow c_A(t) + c_P(t)$ ist konstant, also auch $c_A(t) + c_P(t) = c_A(0) + c_P(0) = a$; entsprechendes gilt für $c_B(t) + c_P(t)$.

Damit folgt aus der letzten DGL

$$c_P'(t) = k(a - c_P(t))(b - c_P(t)).$$

Dies ist eine DGL mit getrennten Variablen!

$$\Rightarrow \int \frac{dc_P}{(a - c_P)(b - c_P)} = \int k dt = kt + \alpha \text{ mit } \alpha \in \mathbb{R}.$$

Wir betrachten ab jetzt nur den (realistischen) Fall $a \neq b$; der Fall $a = b$ ist einfach. Dann berechnet man das unbestimmte Integral $\int \frac{dx}{(a - x)(b - x)}$ mittels Partialbruchzerlegung. Aus

$$\frac{1}{(a - x)(b - x)} = \frac{1}{b - a} \left(\frac{1}{a - x} - \frac{1}{b - x} \right)$$

erhält man

$$\int \frac{dx}{(a - x)(b - x)} = -\frac{1}{b - a} \ln \left| \frac{a - x}{b - x} \right| = \frac{1}{a - b} \ln \left| \frac{a - x}{b - x} \right|.$$

Einsetzen liefert

$$\frac{1}{a - b} \ln \left| \frac{a - c_P}{b - c_P} \right| = kt + \alpha.$$

Zur Bestimmung der Integrationskonstante α setzt man $t = 0$ ein:

$$\frac{1}{a - b} \ln \left| \frac{a}{b} \right| = \alpha.$$

Mit diesem Wert für α ergibt sich weiter:

$$\frac{1}{a - b} \ln \left| \frac{b(a - c_P)}{a(b - c_P)} \right| = kt \quad \Rightarrow \quad \left| \frac{a - c_P}{b - c_P} \right| = \frac{a}{b} e^{k(a-b)t}.$$

Solange $c_P(t) \leq a$ und $c_P(t) \leq b$ gilt, können die Beträge entfallen. Anschaulich sollte dies für alle Zeiten $t \geq 0$ gelten, denn erst bei vollständigem Umsatz ist $c_P = \min\{a, b\}$. Für eine mathematisch korrekte Lösung muss diese Annahme im Nachhinein geprüft werden!

$$\Rightarrow \frac{a - c_P(t)}{b - c_P(t)} = \frac{a}{b} e^{k(a-b)t} \quad \Rightarrow \quad c_P(t) = ab \frac{1 - e^{k(a-b)t}}{b - a e^{k(a-b)t}}$$

[Überprüfen der Annahme:

Rechnung liefert: $c'_P(t) = k \frac{b}{a} \frac{(a-b)^2}{\left(\frac{b}{a} - e^{k(a-b)t}\right)^2} e^{k(a-b)t} > 0$

Damit ist $c_P(t)$ streng monoton wachsend, folglich $c_P(t) < \lim_{t \rightarrow \infty} c_P(t)$.

$\lim_{t \rightarrow \infty} c_P(t) = ?$

(i)

$$a - b < 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} e^{k(a-b)t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} c_P(t) = ab \cdot \frac{1}{b} = a = \min\{a, b\}$$

(ii)

$$a - b > 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} e^{-k(a-b)t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{t \rightarrow \infty} c_P(t) = ab \cdot \frac{-1}{-a} = b = \min\{a, b\} \quad \Bigg]$$

Bei der Lösung des AWP's

$$y' = g(t)h(y), \quad y(t_0) = y_0$$

kann der Anfangswert sofort eingerechnet werden. Dazu integriert man von t_0 bis t :

$$\int_{y(t_0)}^{y(t)} \frac{dx}{h(x)} = \boxed{\int_{y_0}^{y(t)} \frac{dx}{h(x)} = \int_{t_0}^t g(s) ds}$$

Ausrechnen und Auflösen nach $y(t)$ liefert die Lösung.

Beispiel 8.2.3:

$$y' = t y, \quad y(0) = y_0$$

$$\Rightarrow \quad \int_{y_0}^{y(t)} \frac{dx}{x} = \int_0^t s ds \quad \Rightarrow \quad \ln(x) \Big|_{y_0}^{y(t)} = \frac{1}{2} s^2 \Big|_0^t$$

$$\Rightarrow \quad \ln \left| \frac{y(t)}{y_0} \right| = \frac{1}{2} t^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{y(t)}{y_0} = e^{t^2/2} \quad \Rightarrow \quad y(t) = y_0 e^{t^2/2}.$$

8.3 Lineare DGLen 1. Ordnung

Darunter versteht man die inhomogene, lineare DGL

$$\boxed{y'(t) + a(t)y(t) = f(t).} \tag{8.1}$$

Die allgemeine Lösung dieser DGL ist die Summe aus einer speziellen Lösung y_s und der allgemeinen Lösung y_h der zugehörigen homogenen DGL

$$\boxed{y'(t) + a(t)y(t) = 0.}$$

Lösungsverfahren:

- (a) Bestimme die allgemeine Lösung der homogenen DGL $y' = -a(t)y$. Dies ist eine DGL mit getrennten Variablen. Sei $A(t)$ eine Stammfunktion von $a(t)$, also $A'(t) = a(t)$. Dann ist

$$y_h(t) = ce^{-A(t)} \quad \text{mit } c \in \mathbb{R} \text{ beliebig}$$

die allgemeine Lösung.

- (b) Bestimme eine spezielle Lösung der inhomogenen DGL.

Ansatz („Variation der Konstanten“): $y_s(t) = c(t)e^{-A(t)}$.

Einsetzen in $y' + a(t)y = f(t)$ liefert:

$$c'(t)e^{-A(t)} + c(t)e^{-A(t)}(-a(t)) + a(t)c(t)e^{-A(t)} = f(t)$$

$$\Rightarrow c'(t)e^{-A(t)} = f(t) \quad \Rightarrow \quad c'(t) = e^{A(t)}f(t).$$

$$c(t) = \int e^{A(t)}f(t) dt \quad \Rightarrow \quad y_s(t) = e^{-A(t)} \int e^{A(t)}f(t) dt$$

Fazit:

$$y(t) = ce^{-A(t)} + e^{-A(t)} \int e^{A(t)}f(t) dt \quad \text{mit } c \in \mathbb{R} \text{ beliebig}$$

ist die allgemeine Lösung der DGL

$$y'(t) + a(t)y(t) = f(t).$$

Beispiel 8.3.1: Folgereaktion $A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C$.

Zur Zeit $t = 0$ sei $c_A(0) = a$, $c_B(0) = 0$, $c_C(0) = 0$.

Wie verläuft die Konzentration von C ? Das gesamte DGL-System lautet:

$$\begin{aligned} c'_A &= -k_1c_A, & c_A(0) &= a \\ c'_B &= k_1c_A - k_2c_B, & c_B(0) &= 0 \\ c'_C &= k_2c_B, & c_C(0) &= 0. \end{aligned}$$

1. Schritt: Löse $c'_A = -k_1c_A$, $c_A(0) = a$. $\Rightarrow c_A(t) = ae^{-k_1t}$

2. Schritt: Löse $c'_B = k_1 c_A - k_2 c_B$, $c_B(0) = 0 \Leftrightarrow c'_B + k_2 c_B = k_1 a e^{-k_1 t}$, $c_B(0) = 0$. Dies ist eine lineare DGL 1. Ordnung. Wir betrachten den Fall $k_1 \neq k_2$; der Fall $k_1 = k_2$ geht entsprechend. In (8.1) ist also jetzt $a(t) = k_2$ und $f(t) = k_1 a e^{-k_1 t}$. Mit $A(t) = k_2 t$ lautet die allgemeine Lösung der DGL:

$$\begin{aligned} c_B(t) &= \alpha e^{-k_2 t} + e^{-k_2 t} \int e^{k_2 t} k_1 a e^{-k_1 t} dt \text{ mit } \alpha \in \mathbb{R} \\ &= \alpha e^{-k_2 t} + e^{-k_2 t} k_1 a \frac{1}{k_2 - k_1} e^{(k_2 - k_1)t} \\ &= \alpha e^{-k_2 t} + a \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} \end{aligned}$$

Die Anfangsbedingung liefert $c_B(0) = \alpha + a \frac{k_1}{k_2 - k_1} \stackrel{!}{=} 0$

$$\Rightarrow c_B(t) = a \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}).$$

3. Schritt: Berechne $c_C(t)$ aus $c'_C = k_2 c_B$, $c_C(0) = 0$. Integration liefert

$$\begin{aligned} c_C(t) &= \int_0^t k_2 c_B(s) ds = a \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \int_0^t (e^{-k_1 s} - e^{-k_2 s}) ds \\ &= a \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \left(-\frac{1}{k_1} e^{-k_1 s} + \frac{1}{k_2} e^{-k_2 s} \right) \Big|_0^t \\ &= a \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \left(-\frac{1}{k_1} e^{-k_1 t} + \frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_2} e^{-k_2 t} - \frac{1}{k_2} \right) \\ &= a \frac{k_1 k_2}{k_2 - k_1} \frac{k_2 - k_1}{k_1 k_2} + \frac{a}{k_2 - k_1} (k_1 e^{-k_2 t} - k_2 e^{-k_1 t}) \\ \Rightarrow c_C(t) &= a \left(1 + \frac{k_1 e^{-k_2 t} - k_2 e^{-k_1 t}}{k_2 - k_1} \right). \end{aligned}$$

Anmerkung: In einfachen Fällen kann man eine spezielle Lösung der inhomogenen Gleichung eventuell „erraten“. Betrachten wir das Beispiel von oben $c'_B + k_2 c_B = a k_1 e^{-k_1 t}$.

Die rechte Seite hat die Form $\alpha e^{-k_1 t}$; versuche den Ansatz $c_B(t) = \beta e^{-k_1 t}$. Einsetzen liefert

$$-k_1 \beta e^{-k_1 t} + k_2 \beta e^{-k_1 t} \stackrel{!}{=} a k_1 e^{-k_1 t};$$

dies ist erfüllt für $\beta = a \frac{k_1}{k_2 - k_1}$.

Die allgemeine Lösung der homogenen DGL $c'_B + k_2 c_B = 0$ lautet $c_B(t) = \alpha e^{-k_2 t}$ mit $\alpha \in \mathbb{R}$, also ist die allgemeine Lösung der inhomogenen DGL

$$c_B(t) = \alpha e^{-k_2 t} + a \frac{k_1}{k_2 - k_1} e^{-k_1 t} \quad (\text{vgl. oben})$$

Zur Lösung des AWP

$$y' + a(t)y = f(t), \quad y(t_0) = y_0$$

kann man wieder bestimmte Integration verwenden, um den Anfangswert sofort einzurechnen. Die Lösung lautet

$$y(t) = y_0 \exp \left(- \int_{t_0}^t a(s) ds \right) + \int_{t_0}^t \exp \left(- \int_s^t a(\tau) d\tau \right) f(s) ds.$$

Beispiel 8.3.2: $y' + y = \sin t$, $y(0) = 1$. Hier ist $a(t) \equiv 1$.

Lösung: $y(t) = e^{-t} + \int_0^t e^{-(t-s)} \sin s ds.$

Mit $\int e^s \sin s ds = \frac{1}{2} e^s (\sin s - \cos s)$ folgt

$$y(t) = e^{-t} + e^{-t} \left(\frac{1}{2} e^s (\sin s - \cos s) \right) \Big|_0^t = \frac{3}{2} e^{-t} + \frac{1}{2} (\sin t - \cos t).$$

8.4 Lineare Differentialgleichungen 2. Ordnung

Die allgemeine lineare DGL 2. Ordnung hat die Form

$$y''(t) + a(t)y'(t) + b(t)y(t) = f(t).$$

Die allgemeine Lösung hat wieder die folgende Struktur:

Allgemeine Lösung der inhomogenen DGL

= spezielle Lösung der inhomogenen DGL + allgemeine Lösung der homogenen DGL

Für diese DGL gibt es kein allgemeines Verfahren zur Berechnung der Lösungen, allerdings für den wichtigen *Spezialfall konstanter Koeffizienten*, d.h. für $a(t) \equiv a, b(t) \equiv b$.

Lösungsverfahren für die DGL

$$y''(t) + ay'(t) + by(t) = f(t).$$

1. Schritt: Berechne die allgemeine Lösung der homogenen DGL

$$y''(t) + ay'(t) + by(t) = 0.$$

Verwende dazu den *Exponentialansatz*: $y(t) = e^{\lambda t}$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$.

Motivation: Bis auf konstante Faktoren sollten $y(t)$, $y'(t)$ und $y''(t)$ vom gleichen Typ sein, damit die Linearkombination $y'' + ay' + by$ Null ergeben kann!

Beachte: Im Ansatz $y(t) = e^{\lambda t}$ sind komplexe $\lambda \in \mathbb{C}$ erlaubt!

Einsetzen von $y(t) = e^{\lambda t}$ in die homogene DGL ergibt

$$\lambda^2 e^{\lambda t} + a\lambda e^{\lambda t} + be^{\lambda t} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\lambda^2 + a\lambda + b = 0}$$

Die quadratische Gleichung hat die beiden Lösungen

$$\lambda_1 = -\frac{a}{2} + \sqrt{D}, \lambda_2 = -\frac{a}{2} - \sqrt{D} \quad \text{mit } D = \frac{a^2}{4} - b.$$

Das Vorzeichen der Diskriminante D entscheidet über den Typ der allgemeinen Lösung.

1. Fall: $D > 0 \Rightarrow$ beide Lösungen λ_1, λ_2 sind reell und verschieden. Dann ist

$$\boxed{y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 e^{\lambda_2 t} \quad \text{mit } c_1, c_2 \in \mathbb{R} \text{ beliebig}}$$

die allgemeine Lösung.

2. Fall: $D = 0 \Rightarrow$ doppelte reelle Lösung $\lambda_1 = \lambda_2$. Dann ist

$$\boxed{y(t) = c_1 e^{\lambda_1 t} + c_2 t e^{\lambda_1 t} \quad \text{mit } c_1, c_2 \in \mathbb{R} \text{ beliebig}}$$

die allgemeine Lösung.

3. Fall: $D < 0 \Rightarrow$ Zwei konjugiert komplexe Lösungen

$$\lambda_1 = -\frac{a}{2} + i\omega, \quad \lambda_2 = -\frac{a}{2} - i\omega \quad \text{mit } \omega = \sqrt{-D}.$$

Dann gilt (Eulertheorem)

$$e^{\lambda_1 t} = e^{-\frac{a}{2}t} e^{i\omega t} = e^{-\frac{a}{2}t} (\cos \omega t + i \sin \omega t)$$

$$e^{\lambda_2 t} = e^{-\frac{a}{2}t} e^{-i\omega t} = e^{-\frac{a}{2}t} (\cos \omega t - i \sin \omega t).$$

Dies sind zwei komplexe Lösungen!

Real- und Imaginärteil dieser Funktionen sind ebenfalls Lösungen der homogenen DGL. Daher ist

$$y(t) = e^{-\frac{a}{2}t}(c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t) \text{ mit } c_1, c_2 \in \mathbb{R} \text{ beliebig}$$

die allgemeine Lösung. Eine andere Darstellung ist

$$y(t) = Ae^{-\frac{a}{2}t} \sin(\omega t - \delta) \text{ mit } A \geq 0, \delta \in [0, 2\pi).$$

Dies ist eine exponentiell abklingende harmonische Schwingung mit der Schwingungsfrequenz $f = \frac{\omega}{2\pi}$ (Schwingungsdauer $T = \frac{2\pi}{\omega}$). Daher wird der Fall $D < 0$ auch als Schwingungsfall bezeichnet; der Fall $D = 0$ heißt aperiodischer Grenzfall.

Beispiel 8.4.1: Welche Schwingungsdauer hat ein 1m langes Fadenpendel für kleine Auslenkungen? Die (Winkel-)Auslenkung wird durch die DGL

$$\ddot{\varphi}(t) + \frac{g}{l} \sin \varphi(t) = 0$$

beschrieben. Diese DGL ist nichtlinear und kann mit obigem Ansatz nicht gelöst werden! Andererseits gilt für kleine Auslenkungen $\sin \varphi \approx \varphi$. Daher betrachtet man (für kleine Auslenkungen) als Näherung die „linearisierte“ DGL

$$\ddot{\varphi} + \frac{g}{l} \varphi = 0 \text{ bzw. } \ddot{\varphi} + \omega^2 \varphi = 0 \text{ mit } \omega = \sqrt{\frac{g}{l}}.$$

Der Ansatz $\varphi(t) = e^{\lambda t}$ liefert $\lambda^2 + \omega^2 = 0$, also $\lambda_1 = i\omega, \lambda_2 = -i\omega$. Damit lautet die allgemeine Lösung

$$\varphi(t) = A \sin(\omega t - \delta) \text{ mit } A \geq 0, \delta \in [0, 2\pi).$$

Dies sind ungedämpfte harmonische Schwingungen mit der Schwingungsdauer $T = \frac{2\pi}{\omega}$.

$$\text{Mit } \omega = \sqrt{\frac{g}{l}} = \sqrt{\frac{9.81}{1}} \left[\sqrt{\frac{1}{s^2}} \right] \approx 3.1 \left[\frac{1}{s} \right] \text{ folgt } T \approx \frac{2\pi}{3.1} [s] \approx 2 [s].$$

Bemerkung 8.4.2. Die Frage, ob ein kleiner Fehler beim Ersetzen von $\sin \varphi$ durch φ in der DGL auf eine kleine Abweichung zwischen den Lösungen führt, muss mathematisch untersucht werden. Dies ist nicht selbstverständlich, stimmt aber im obigen Beispiel.

Zusammenfassung von Schritt 1: Die allgemeine Lösung der homogenen DGL

$$y'' + ay' + by = 0$$

hat die Form

$$y(t) = \alpha y_1(t) + \beta y_2(t) \text{ mit } \alpha, \beta \in \mathbb{R} \text{ beliebig.}$$

Dabei ist

$$\begin{array}{lll} y_1(t) = e^{\lambda_1 t}, & y_2(t) = e^{\lambda_2 t} & \text{für } D > 0 \\ y_1(t) = e^{\lambda_1 t}, & y_2(t) = t e^{\lambda_1 t} & \text{für } D = 0 \\ y_1(t) = e^{-\frac{a}{2}t} \cos \omega t, & y_2(t) = e^{-\frac{a}{2}t} \sin \omega t & \text{für } D < 0, \end{array}$$

mit den Abkürzungen $D = \frac{a^2}{4} - b, \omega = \sqrt{-D}$ und $\lambda_{1,2} = -\frac{a}{2} \pm \sqrt{D}$.

Bemerkung 8.4.3. Die Funktionen $y_1(t), y_2(t)$ sind in allen Fällen linear unabhängig (d.h. $\alpha y_1(t) + \beta y_2(t) \equiv 0 \Rightarrow \alpha = \beta = 0$; analog zu Vektoren); sie heißen *Fundamentallösungen* der DGL, da sie die allgemeine Lösung „aufspannen“.

2. Schritt: Finde eine spezielle Lösung von $y'' + ay' + by = f(t)$.

Methode I. Versuche für

die rechte Seite f	den Ansatz
$e^{\alpha t}(a_1 \cos \omega t + a_2 \sin \omega t)$	$e^{\alpha t}(b_1 \cos \omega t + b_2 \sin \omega t)$
$a_n t^n + \dots + a_1 t + a_0$	$b_n t^n + \dots + b_1 t + b_0$

Beispiel 8.4.4:

$$y'' + \omega^2 y = \sin \omega_0 t \quad (\text{mit } \omega, \omega_0 > 0).$$

Ansatz:

$$y_s(t) = b_1 \cos \omega_0 t + b_2 \sin \omega_0 t.$$

Einsetzen in die DGL ergibt:

$$\begin{aligned} y_s'' + \omega^2 y_s &= b_1(\omega^2 - \omega_0^2) \cos \omega_0 t + b_2(\omega^2 - \omega_0^2) \sin \omega_0 t \stackrel{!}{=} \sin \omega_0 t. \\ \Rightarrow \quad b_1 &= 0, \quad b_2 = \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2}, \quad y_s(t) = \frac{1}{\omega^2 - \omega_0^2} \sin \omega_0 t \quad \text{für } \underline{\omega \neq \omega_0}. \end{aligned}$$

Beachte: Die Amplitude von $y_s(t)$ ist $A = \frac{1}{|\omega^2 - \omega_0^2|}$ und $A \rightarrow \infty$ für $\omega_0 \rightarrow \omega$ („Resonanzkatastrophe“). Für $\omega = \omega_0$ funktioniert der Ansatz nicht!

Methode II. Variation der Konstanten. Verwende den Ansatz

$$y_s(t) = \alpha(t)y_1(t) + \beta(t)y_2(t),$$

wobei $y_1(t)$, $y_2(t)$ die Fundamentallösungen der homogenen DGL sind. Dann ist

$$y_s'(t) = \alpha'(t)y_1(t) + \alpha(t)y_1'(t) + \beta'(t)y_2(t) + \beta(t)y_2'(t).$$

Verlange zusätzlich:

$$\alpha'(t)y_1(t) + \beta'(t)y_2(t) = 0. \tag{8.2}$$

Dann gilt

$$y_s'(t) = \alpha(t)y_1'(t) + \beta(t)y_2'(t).$$

Ableiten ergibt

$$y_s''(t) = \alpha'(t)y_1'(t) + \alpha(t)y_1''(t) + \beta'(t)y_2'(t) + \beta(t)y_2''(t).$$

Jetzt setzen wir y_s , y_s' und y_s'' in die DGL ein:

$$\begin{aligned} y_s''(t) + a y_s'(t) + b y_s(t) &= \alpha'(t)y_1'(t) + \alpha(t)y_1''(t) + \beta'(t)y_2'(t) + \beta(t)y_2''(t) \\ &\quad + a \alpha(t)y_1'(t) + a \beta(t)y_2'(t) + b \alpha(t)y_1(t) + b \beta(t)y_2(t) \\ &= \alpha'(t)y_1'(t) + \beta'(t)y_2'(t) + \alpha(t) [y_1''(t) + a y_1'(t) + b y_1(t)] \\ &\quad + \beta(t) [y_2''(t) + a y_2'(t) + b y_2(t)] \\ &\stackrel{!}{=} f(t), \end{aligned}$$

die Ausdrücke in den eckigen Klammern verschwinden, weil die Fundamentallösungen $y_1(t)$ und $y_2(t)$ die homogene DGL erfüllen, also:

$$\alpha'(t)y_1'(t) + \beta'(t)y_2'(t) \stackrel{!}{=} f(t). \tag{8.3}$$

(8.2) und (8.3) sind zwei Gleichungen für die beiden Unbekannten $\alpha'(t)$ und $\beta'(t)$. Auflösen des Gleichungssystems mit der Cramer'schen Regel ergibt:

$$\alpha'(t) = -\frac{y_2(t)f(t)}{y_1(t)y_2'(t) - y_2(t)y_1'(t)}, \quad \beta'(t) = \frac{y_1(t)f(t)}{y_1(t)y_2'(t) - y_2(t)y_1'(t)}.$$

Integration liefert $\alpha(t), \beta(t)$ und damit

$$y_s(t) = -y_1(t) \int \frac{y_2(t)f(t)}{y_1(t)y_2'(t) - y_2(t)y_1'(t)} dt + y_2(t) \int \frac{y_1(t)f(t)}{y_1(t)y_2'(t) - y_2(t)y_1'(t)} dt.$$

Beispiel 8.4.5:

$$y'' + \omega^2 y = \sin \omega t \quad (\text{mit } \omega > 0).$$

Hier ist $y_1(t) = \cos \omega t$ und $y_2(t) = \sin \omega t \Rightarrow y_1(t)y_2'(t) - y_2(t)y_1'(t) \equiv \omega$.

$$\Rightarrow \alpha'(t) = -\frac{1}{\omega} \sin^2 \omega t, \quad \beta'(t) = \frac{1}{\omega} \sin \omega t \cos \omega t$$

$$\Rightarrow \alpha(t) = \frac{\sin \omega t \cos \omega t - \omega t}{2\omega^2}, \quad \beta(t) = \frac{\sin^2 \omega t - \cos^2 \omega t}{4\omega^2}.$$

$$\Rightarrow y_s(t) = -\frac{t}{2\omega} \cos \omega t + \frac{1}{4\omega^2} \sin \omega t.$$

Der zweite Summand $\frac{1}{4\omega^2} \sin \omega t$ ist eine Lösung der homogenen DGL. Daher ist

$$\tilde{y}_s(t) = -\frac{t}{2\omega} \cos \omega t$$

ebenfalls Lösung der inhomogenen DGL. Die allgemeine Lösung lautet also:

$$y(t) = -\frac{t}{2\omega} \cos \omega t + \alpha \cos \omega t + \beta \sin \omega t, \quad \text{mit } \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

8.5 Lineare Differentialgleichungssysteme 1. Ordnung

Anhand des nachfolgenden Beispiels soll ein Teil der Lösungstheorie für lineare DGL-Systeme erläutert werden.

Beispiel 8.5.1: System elementarer Reaktionen der Form $A \xrightarrow{k_1} B \xrightleftharpoons[k_3]{k_2} C$

Die Konzentrationsverläufe genügen den DGLen

$$\left. \begin{aligned} c'_A &= -k_1 c_A \\ c'_B &= k_1 c_A - k_2 c_B + k_3 c_C \\ c'_C &= k_2 c_B - k_3 c_C \end{aligned} \right\} \quad (8.4)$$

$$\text{Setze } y = \begin{pmatrix} c_A(t) \\ c_B(t) \\ c_C(t) \end{pmatrix} \text{ und } A = \begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & k_3 \\ 0 & k_2 & -k_3 \end{pmatrix}.$$

Dann lautet (8.4) in Matrixschreibweise:

$$\boxed{y'(t) = A y(t).}$$

Wie findet man Lösungen von $y' = Ay$ für $A \in M_{n,n}(\mathbb{R})$? Versuche den Exponentialansatz

$$y(t) = e^{\lambda t} z \quad \text{mit } \lambda \in \mathbb{C}, z \in \mathbb{C}^n, z \neq 0.$$

Einsetzen liefert:

$$y'(t) = \lambda e^{\lambda t} z \stackrel{!}{=} A e^{\lambda t} z = e^{\lambda t} A z \quad \Leftrightarrow \quad A z = \lambda z$$

Eine Zahl $\lambda \in \mathbb{C}$ für die

$$\boxed{A z = \lambda z \text{ mit einem } z \in \mathbb{C}^n, z \neq 0}$$

gilt, heißt *Eigenwert von A*. Jeder zugehörige Vektor $z \in \mathbb{C}^n$ mit $z \neq 0$ heißt *Eigenvektor* zum Eigenwert λ . Eigenvektoren sind nur bis auf einen freien Faktor $\neq 0$ festgelegt, wie an der definierenden Gleichung leicht abzulesen ist.

Wie berechnet man Eigenwerte einer Matrix A ? Es gilt

$$A z = \lambda z \quad \Leftrightarrow \quad A z = \lambda I_n z \quad \Leftrightarrow \quad (A - \lambda I_n) z = 0.$$

Dieses lineare Gleichungssystem soll eine Lösung $z \neq 0$ haben. Das gilt genau dann, wenn $\det(A - \lambda I_n) = 0$ erfüllt ist. Die Eigenwerte von A sind daher die Nullstellen des sogenannten *charakteristischen Polynoms* $P(\lambda) = \det(A - \lambda I_n)$.

Satz 8.5.2. Sei $A \in M_{n,n}(\mathbb{R})$.

- (i) *Struktur der allgemeinen Lösung von $y' = Ay$:* Sind $y^1(t), \dots, y^n(t)$ reelle Fundamentallösungen von $y' = Ay$ (also n linear unabhängige Lösungen), so ist

$$y(t) = \alpha_1 y^1(t) + \dots + \alpha_n y^n(t) \text{ mit } \alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{R} \text{ beliebig}$$

die allgemeine Lösung.

- (ii) *Berechnung von Fundamentallösungen:*

- (a) Sei $\lambda \in \mathbb{C}$ Eigenwert von A und $z \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ zugehöriger Eigenvektor. Dann ist $y(t) = e^{\lambda t} z$ eine Lösung von $y' = Ay$. Existieren zum Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ linear unabhängige Eigenvektoren z^1, \dots, z^k , so sind die Lösungen

$$y^1(t) = e^{\lambda t} z^1, \dots, y^k(t) = e^{\lambda t} z^k$$

linear unabhängig.

- (b) Sei $\lambda \in \mathbb{C}$ Eigenwert mit $\lambda \notin \mathbb{R}$, d.h. $\lambda = \alpha + i\beta$ mit $\beta \neq 0$, und $z \in \mathbb{C}^n \setminus \{0\}$ zugehöriger Eigenvektor. Dann sind

$$y^1(t) = \operatorname{Re}(e^{\lambda t} z), \quad y^2(t) = \operatorname{Im}(e^{\lambda t} z)$$

zwei linear unabhängige reelle Lösungen von $y' = Ay$. In diesem Fall ist

$$\bar{\lambda} = \alpha - i\beta$$

ebenfalls Eigenwert von A , der aber keine weiteren reellen Fundamentallösungen liefert.

- (c) Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten sind linear unabhängig. Falls A sogar n verschiedene Eigenwerte $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ mit zugehörigen Eigenvektoren z^1, \dots, z^n hat, folgt daher:

$$y^1(t) = e^{\lambda_1 t} z^1, \dots, y^n(t) = e^{\lambda_n t} z^n$$

ist ein Fundamentalsystem für $y' = Ay$. Dabei können zwei konjugiert komplexe Lösungen gemäß (b) durch reelle Lösungen ersetzt werden.

Anwendung auf das Beispiel:

Es seien die Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten durch $k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = 3$ gegeben, d.h.

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 3 \\ 0 & 2 & -3 \end{pmatrix}.$$

- (i) Welche Eigenwerte hat A ?

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I_3) &= \begin{vmatrix} -1 - \lambda & 0 & 0 \\ 1 & -2 - \lambda & 3 \\ 0 & 2 & -3 - \lambda \end{vmatrix} \\ &= (-1 - \lambda)(-2 - \lambda)(-3 - \lambda) + 6(\lambda + 1) \\ &= -(\lambda + 1)(\lambda^2 + 5\lambda + 6 - 6) = -(\lambda + 1)\lambda(\lambda + 5). \end{aligned}$$

$$\Rightarrow A \text{ hat die Eigenwerte } \lambda_1 = -1, \lambda_2 = 0, \lambda_3 = -5.$$

- (ii) Welche Eigenvektoren gehören zu den λ_i ?

Eigenvektor zu $\lambda_1 = -1$: Löse $(A + I_3)z = 0 \Leftrightarrow$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 3 \\ 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

z_3 wird als freier Parameter gewählt. Damit ergibt sich

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3z_3 \\ 2z_3 \end{pmatrix}$$

Also ist $z_2 = z_3$ und $z_1 = -2z_3$. Wird der freie Parameter $z_3 = 1$ gesetzt, so ergibt sich als Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_1 = -1$

$$z = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Eigenvektor zu $\lambda_2 = 0$: Löse $Az = 0$. Rechnung liefert $z_1 = 0, 2z_2 = 3z_3$.

Also ist $\begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$ Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_2 = 0$.

Eigenvektor zu $\lambda_3 = -5$. Löse $(A + 5I_3)z = 0 \Rightarrow z_1 = 0, z_2 + z_3 = 0$

Also ist $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix}$ Eigenvektor zum Eigenwert $\lambda_3 = -5$.

Da drei verschiedene reelle Eigenwerte existieren, gilt nach Satz 8.5.2:

$$y^1(t) = \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-t}, \quad y^2(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad y^3(t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-5t}$$

sind drei Fundamentallösungen von $y' = Ay$, und

$$y(t) = \alpha_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-t} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} e^{-5t} \text{ mit } \alpha_i \in \mathbb{R}$$

ist die allgemeine Lösung.

Sind zusätzlich die Anfangswerte $c_A(0) = a$, $c_B(0) = 0$ und $c_C(0) = 0$ vorgegeben, so bestimmt man durch Einsetzen von $t = 0$ die Koeffizienten $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$:

$$y(0) = \alpha_1 \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix} + \alpha_3 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Lösung dieses Gleichungssystems liefert

$$\alpha_1 = -\frac{a}{2}, \quad \alpha_2 = \frac{a}{5}, \quad \alpha_3 = -\frac{a}{10}$$

und damit

$$c_A(t) = a e^{-t}$$

$$c_B(t) = a \left(\frac{3}{5} - \frac{1}{2} e^{-t} - \frac{1}{10} e^{-5t} \right)$$

$$c_C(t) = a \left(\frac{2}{5} - \frac{1}{2} e^{-t} + \frac{1}{10} e^{-5t} \right).$$