Übungsblatt 12

Mathematik für die Chemie II

Abgabe am 25. Mail 2016.

Aufgabe 1

Seien $Q(x) = 2(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2) - 2x_1x_2 - 2x_1x_3$ und $P_\alpha(x) = x_1^2 + \alpha x_2 x_3$ mit $x \in \mathbb{R}^3$, $x = (x_1, x_2, x_3)$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ quadratische Formen.

(a) Finden Sie eine symmetrische Matrix $A \in \mathbb{R}^{3\times3}$ mit $Q(x) = \langle x, Ax\rangle$. *(1 Pt.)*

Lösung: Man liest ab:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

(b) Ist Q positiv definit? *(1 Pt.)*

Lösung: Man berechnet die Eigenwerte von A zu $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 2 + \sqrt{2}$ und $\lambda_3 = 2 - \sqrt{2}$. Damit sind alle Eigenwerte positiv, also A positiv definit und damit die quadratische Form Q positiv definit.

(c) Finden Sie eine symmetrische Matrix $A_\alpha \in \mathbb{R}^{3\times3}$ mit $P_\alpha(x) = \langle x, P_\alpha x\rangle$. *(1 Pt.)*

Lösung: Man liest ab:

$$A_\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \alpha/2 \\ 0 & \alpha/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

(d) Für welche Werte von α ist P_α positiv definit, negativ definit, positiv semidefinit, negativ semidefinit und indefinit? *(1 Pt.)*

Lösung: Man berechnet die Eigenwerte von A_α zu $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = \alpha/2$ und $\lambda_3 = -\alpha/2$. Für $\alpha = 0$ ist A_α damit positiv semidefinit, für $\alpha \in \mathbb{R}\backslash\{0\}$ indefinit.

Aufgabe 2

Sei

$$x(t) = \begin{pmatrix} -t \\ (t-1)^3 - 3t \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad t \in [0,2]$$

die Position eines Punktes im $\mathbb{R}^3$ zur Zeit t. Berechnen Sie:

(a) Die Geschwindigkeit $v(t) = x'(t)$ und deren Betrag $||v(t)||$ für $t \in (0,2)$. *(1 Pt.)*

Lösung:

$$v(t) = x'(t) = \begin{pmatrix} -1 \\ 3(t-1)^2 - 3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Weiter ist

$$||v(t)|| = \left|\left| \begin{pmatrix} -1 \\ 3(t-1)^2 - 3 \\ 0 \end{pmatrix} \right|\right| = \sqrt{1 + (3(t-1)^2 - 3)^2}. \tag{1}$$

(b) Zeigen Sie, dass $\max\limits_{t\in(0,2)} ||v(t)||$ existiert und berechnen Sie $\max\limits_{t\in(0,2)} ||v(t)||$. *(2 Pt.)*

Lösung: Berechne zunächst die Ableitung von $||v(t)||$:

$$\frac{d}{dt}||v(t)|| = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sqrt{1 + (3(t-1)^2 - 3)^2}} \cdot 2 \cdot (3(t-1)^2 - 3) \cdot 6(t-1).$$

Da $\sqrt{1 + (3(t-1)^2 - 3)^2} > 0$ für $t \in \mathbb{R}$ ist, gilt

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}||v(t)|| = 0 \quad &\Leftrightarrow \quad (3(t-1)^2 - 3) \cdot (t-1) = 0 \\ &\Leftrightarrow \quad (t-1)^2 - 1 = 0 \quad \text{oder} \quad t - 1 = 0 \\ &\Leftrightarrow \quad t = 0 \quad \text{oder} \quad t = 1 \quad \text{oder} \quad t = 2. \end{aligned}$$

Da $||v||$ stetig und stetig differenzierbar in $(0,2)$ ist und $0, 2 \notin (0,2)$, ist der einzige Kandidat für das Maximum von $||v(t)||$ in $(0,2)$ der Wert $||v(1)|| = \sqrt{10}$.

Es könnte sein, dass $\lim\limits_{t\to 0}||v(t)|| > \sqrt{10}$ oder $\lim\limits_{t\to 2}||v(t)|| > \sqrt{10}$. In diesem Fall würde $\max\limits_{t\in(0,2)}||v(t)||$ nicht existieren, sondern nur das Supremum, $\sup\limits_{t\in(0,2)} ||v(t)||$ (vergleiche Mathematik für die Chemie I). Es gilt

$$\lim_{t\to 0}||v(t)|| \overset{\text{Gl. (1)}}{=} \sqrt{1 + (3(0-1)^2 - 3)^2} = 1 \quad \text{und}$$

$$\lim_{t\to 2}||v(t)|| \overset{\text{Gl. (1)}}{=} \sqrt{1 + (3(2-1)^2 - 3)^2} = 1.$$

Damit existiert $\max_{t\in(0,2)} ||v(t)||$ und es gilt $\max_{t\in(0,2)} ||v(t)|| = \sqrt{10}$.

(c) In welche Richtung $y \in \mathbb{R}^3$ bewegt sich der Punkt, wenn er die Maximalgeschwindigkeit aus (b) besitzt? *(1 Pt.)*

Lösung: Die Richtung y der Bewegung am Zeitpunkt $t = 1$ ist gegeben durch

$$y = v(1) = \begin{pmatrix} -1 \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Aufgabe 3

Bestimmen Sie alle ersten partiellen Ableitungen der folgenden Funktionen.

Vorbemerkung: Wir benutzen im folgenden die Konventionen

$$\partial_x := \frac{\partial}{\partial x}, \quad \partial_y := \frac{\partial}{\partial y}, \quad \partial_z := \frac{\partial}{\partial z}.$$

(a) $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, (x, y) \mapsto x^5y^2 + x^3y^7$. *(1 Pt.)*

Lösung: Es gilt

$$\begin{aligned} (\partial_x f)(x, y) &= 5x^4y^2 + 3x^2y^7, \\ (\partial_y f)(x, y) &= 2x^5y + 7x^3y^6. \end{aligned}$$

(b) $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, (x, y) \mapsto \cos(x^2 + y^4)$. *(1 Pt.)*

Lösung: Es gilt mit der Kettenregel

$$\begin{aligned} (\partial_x f)(x, y) &= -2x \sin(x^2 + y^4), \\ (\partial_y f)(x, y) &= -4y^3 \sin(x^2 + y^4). \end{aligned}$$

(c) $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, (x, y) \mapsto \log(e^{3x^2} + 5y^2)$. *(1 Pt.)*

Lösung: Es gilt mit der Kettenregel

$$\begin{aligned} (\partial_x f)(x, y) &= \frac{6xe^{3x^2}}{e^{3x^2} + 5y^2}, \\ (\partial_y f)(x, y) &= \frac{10y}{e^{3x^2} + 5y^2}. \end{aligned}$$

(d) $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}, (x, y, z) \mapsto 2^{xy} + e^{xz} + \pi^{yz}$. *(1 Pt.)*

Lösung: Mit $a^b = e^{b\log(a)}$ und der Kettenregel erhalten wir

$$\begin{aligned}(\partial_x f)(x, y, z) &= \log(2)y2^{xy} + ze^{xz},\\ (\partial_y f)(x, y, z) &= \log(2)x2^{xy} + \log(\pi)z\pi^{yz},\\ (\partial_z f)(x, y, z) &= xe^{xz} + \log(\pi)y\pi^{yz}.\end{aligned}$$

Aufgabe 4

Seien $a, b, c \in \mathbb{R}$ mit $a \geq 0, c > 0$.

(a) Bestimmen Sie alle Maxima und Minima der Funktion $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, x \mapsto ae^{-x^2} - b$, in Abhängigkeit von a und b. *(2 Pt.)*

Lösung: Falls $a = 0$, so ist $f = -b$ konstant und somit besitzt f in jedem $x \in \mathbb{R}$ ein Maximum und ein Minimum.
Falls $a > 0$, so erhalten wir

$$f'(x) = -2axe^{-x^2}, \quad f''(x) = -2ae^{-x^2} + 4ax^2e^{-x^2}.$$

Da $e^{-x^2} > 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$, folgt, dass die einzige Nullstelle von f' in $x_0 = 0$ liegt. Einsetzen in obige Gleichung ergibt $f''(x_0) = -2a < 0$ und damit liegt das eindeutige strikte Maximum von f in $x_0 = 0$. Da x_0 die einzige Nullstelle von f' ist, besitzt f keine Minima.

(b) Bestimmen Sie alle Maxima und Minima der Funktion $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, y \mapsto cy^2 - 2y$, in Abhängigkeit von c. *(1 Pt.)*

Lösung: Per Annahme ist $c > 0$ und damit erhalten wir mit einer zu Teil (a) analogen Rechnung, dass das eindeutige strikte Minimum von g in $y_0 = \frac{1}{c}$ liegt ($g'(y) = 2cy - 2, g''(y) = 2c > 0$). Da y_0 die einzige Nullstelle von g' ist, besitzt g keine Maxima.

(c) Besitzt auch die Funktion $h : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, (x, y) \mapsto y^2e^{-x^2} - 2y$, ein globales Maximum oder ein globales Minimum in $\mathbb{R}^2$? *(1 Pt.)*

Lösung: Wir argumentieren, warum h weder ein globales Maximum noch ein globales Minimum besitzen kann.
Angenommen, h besitzt ein globales Maximum. Halten wir die y-Variable fest, besitzen die so entstehenden Funktionen $\mathbb{R} \ni x \mapsto f_y(x) := h(x, y) \in \mathbb{R}$ nach Teil (a) ein Maximum bei $x = 0$. Das Maximum M_y dieser Funktionen hat den Wert $M_y = h(0, y) = y^2 - 2y$. Gäbe es ein globales Maximum von h, müsste der Wert von M_y für ein bestimmtes y maximiert werden. Nach Teil (b) besitzt die Funktion

$M(y) : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ mit $y \mapsto M(y) := M_y$ jedoch kein Maximum (, sondern nur ein eindeutiges striktes Minimum), also kann h kein globales Maximum besitzen.
Nehmen wir nun analog an, dass h ein globales Minimum besitzt. In diesem Fall muss mindestens eine der von y abhängigen Funktionen $\mathbb{R} \ni x \mapsto f_y(x) = h(x,y) \in \mathbb{R}$ ein Minimum besitzen. Nach Teil (a) besitzt nur f_0 ein Minimum, denn f_0 ist die konstante Funktion mit Wert $f_0(x) = h(x,0) = 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$. Alle anderen Funktionen f_y mit $y \neq 0$ besitzen kein Minimum (, sondern nur ein eindeutiges, von x abhängiges striktes Maximum). Existiert ein globales Minimum von h, so muss die y-Koordinate dieser Stelle also $y_0 = 0$ sein. Nun ist $h(x,0) = 0$ für alle $x \in \mathbb{R}$, aber $h(0,1) = -1 < 0$, was bedeutet, dass h kein globales Minimum besitzen kann.

Alternativ-Lösung: Wir berechnen $(\nabla h)(x,y) = (-2xy^2e^{-x^2}, 2ye^{-x^2} - 2)$ und sehen, dass die einzige Nullstelle des Gradienten, und damit die einzige potentielle Stelle für ein Maximum oder ein Minimum von h, bei $(x_0, y_0) = (0,1)$ liegt. Es gilt $h(0,1) = -1$. Jedoch ist $h(1,1) = \frac{1}{e} - 2 < -1$ und $h(0,2) = 4 - 4 = 0 > -1$, also besitzt h kein globales Maximum und kein globales Minimum.