Universität München
Departament Chemie
Lehrbereich Phys. Chemie
Prof. Dr. H. Ebert

WS 21/22
Blatt 13
01. 02. 2022

Musterlösung der Blatt 13 zur Vorlesung „Einführung in die mathematische Behandlung der Naturwissenschaften I“

1. Berechnen Sie die erste, zweite und dritte Ableitung der folgenden Funktionen nach ihrer jeweiligen Variablen:

   a) $f(\omega) = \ln \omega$

   b) $g(\phi) = a \sin \phi + \tan \phi$

   c) $f(u) = e^{-au^2}$

   d) $f(z) = z^z$

   e) $f(y) = \log_2 y^2$

   Lösung

   a) $f\,'(\omega) = \dfrac{1}{\omega}\,, \quad f\,''(\omega) = \left(\dfrac{1}{\omega}\right)' = -\dfrac{1}{\omega^2}\,, \quad f\,'''(\omega) = \left(-\dfrac{1}{\omega^2}\right)' = \dfrac{2}{\omega^3}$

   b) $g\,'(\phi) = a \cos \phi + \dfrac{1}{\cos^2 \phi}\,, \quad g\,''(\phi) = -a \sin \phi + \dfrac{2 \sin \phi}{\cos^3 \phi},$

   $$g\,'''(\phi) = -a \cos \phi + \frac{2 \cos^2 \phi + 6 \sin^2 \phi}{\cos^4 \phi}$$

   c)
   $$f(u) = e^{-au^2} \qquad f'(u) = -2aue^{-au^2}$$
   $$f''(u) = -2ae^{-au^2}(1 - 2au^2) \qquad f'''(u) = 4a^2ue^{-au^2}(3 - 2au^2)$$

   d)
   $$f(z) = z^z = \left(e^{\ln z}\right)^z = e^{z \ln z} \qquad f'(z) = z^z(1 + \ln z)$$
   $$f''(z) = z^z(1 + \ln z)^2 + z^{z-1} \qquad f'''(z) = z^z(1 + \ln z)^3 + 3z^{z-1}(1 + \ln z) - z^{z-2}$$

   e)
   $$f(y) = \log_2 y^2 = \frac{\ln y^2}{\ln 2} = \frac{2 \ln y}{\ln 2} \qquad f'(y) = \frac{2}{y \ln 2}$$
   $$f''(y) = -\frac{2}{y^2 \ln 2} \qquad f'''(y) = \frac{4}{y^3 \ln 2}$$

2. Bestimmen Sie die kritischen Punkte – ggf. angeben: Max, Min oder Terassenpunkt – und die Wendepunkte des Morsepotentials

$$V(r) = D\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]^2 - D$$

und skizzieren Sie die Funktion für die Parameterwerte $D = 2$, $a = 0.5$ und $r_0 = 4$ in dem Bereich $0 \le r \le 40$.

Lösung

$$V(r) = D\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]^2 - D$$

Kettenregel

$$V\,'(r) = D\,2\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]\left(-e^{-a(r-r_0)}\right)(-a) = 2aDe^{-a(r-r_0)}\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]$$

Produktregel, Kettenregel

$$V\,''(r) = 2aD\left[\left(e^{-a(r-r_0)}\right)'\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right] + e^{-a(r-r_0)}\left(\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right]\right)'\right]$$

$$\begin{aligned}
&= 2aD\left[e^{-a(r-r_0)}\,(-a)\left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right] + e^{-a(r-r_0)}\left(-e^{-a(r-r_0)}\right)(-a)\right]\\
&= 2aD\left(-a\,e^{-a(r-r_0)} + a\,e^{-2a(r-r_0)} + a\,e^{-2a(r-r_0)}\right)\\
&= 2aD\left(-a\,e^{-a(r-r_0)} + 2\,a\,e^{-2a(r-r_0)}\right)\\
&= 2aD\left(a\,e^{-a(r-r_0)}\left[2\,e^{-a(r-r_0)} - 1\right]\right)
\end{aligned}$$

$$= 2a^2De^{-a(r-r_0)}\left[2e^{-a(r-r_0)} - 1\right]$$

Kritische Punkte:

$$V\,'(r) = 0\,;\ \Rightarrow\ \left[1 - e^{-a(r-r_0)}\right] = 0\ \Rightarrow\ e^{-a(r-r_0)} = 1\ \Rightarrow\ a(r - r_0) = 0$$

$$\Rightarrow\ r = r_0\,;$$

$$V\,''(r_0) = 2Da^2\,;\ \Rightarrow\ \text{für } D > 0 \text{ Minimum}$$

Wendepunkte:

$$V''(r) = 0\,; \;\Rightarrow\; 2a^2 D e^{-a(r-r_0)}\left[2e^{-a(r-r_0)} - 1\right] = 0$$

$$\Rightarrow\; \left[2e^{-a(r-r_0)} - 1\right] = 0 \;\Rightarrow\; 2e^{-a(r-r_0)} = 1$$

$$\Rightarrow\; e^{-a(r-r_0)} = \frac{1}{2}$$

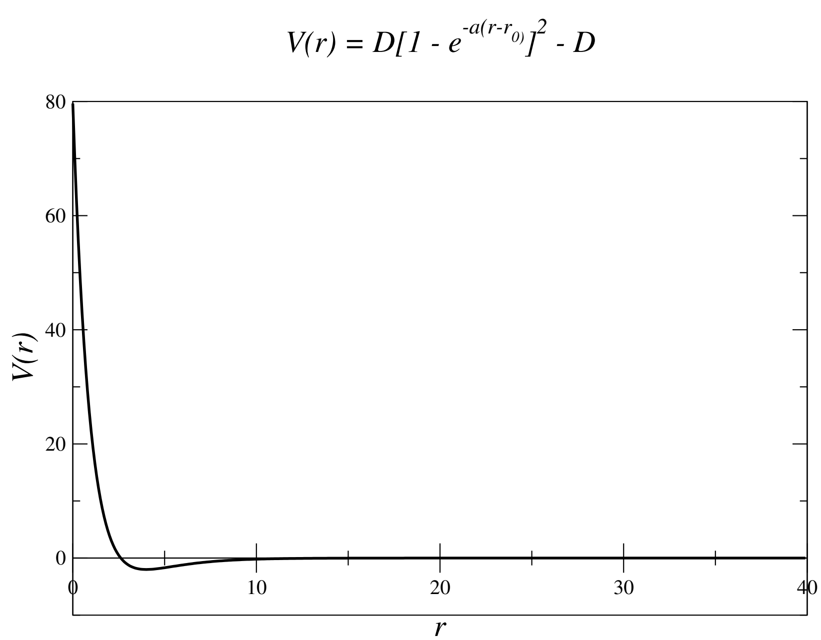
$$\Rightarrow\; \ln\left[e^{-a(r-r_0)}\right] = \ln\left(\frac{1}{2}\right)$$

$$-a(r-r_0) = \ln(1) - \ln(2)$$

$$-a\,r + a\,r_0 = -\ln(2)$$

$$a\,r = a\,r_0 + \ln(2)$$

$$r = r_0 + \frac{\ln 2}{a}\,; \;\; \text{Wendepunkt}$$



3. Konstruieren Sie mit Hilfe des Newtonschen Verfahrens eine Lösung von $\sin x = x^2$ mit $x > 0$. Benutzen Sie $x_0 = 1$ als Startwert und tabellieren Sie die Approximation für x_i bis $i = 5$.

   Vergleichen und diskutieren Sie den Wert mit dem Resultat $x = 0.876726215395$.

   Lösung

$$f(x) = x^2 - \sin x$$

$$f'(x) = 2x - \cos x$$

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

$$x_0 = 1$$

$$x_1 = 1 - \frac{1 - \sin 1}{2 \cdot 1 - \cos 1} = 0.891386$$

$$x_2 = 0.876985$$

$$x_3 = 0.876726$$

$$x_4 = 0.876726$$

$$x_5 = 0.876726$$

4. !!!!! BONUS Aufgabe !!!!!

Kurvendiskussion der Funktion $f(x) = \frac{1}{7}(2x^4 - x^2 - 1)$.

a) Bestimmen Sie den maximalen Definitionsbereich und die Nullstellen (N) von $f(x)$.

b) Bestimmen Sie alle kritischen Punkte von $f(x)$, und untersuchen Sie, ob jeweils ein Minimum (Min), Maximum (Max) oder ein Terassenpunkt (T) vorliegt.

c) Bestimmen Sie die Wendepunkte (W) von $f(x)$.

d) Geben Sie in einer schematischen Zeichnung der Funktion die Bereiche positiver (konvexer) bzw. negativer (konkaver) Krümmung an (mit Begründung). Kennzeichnen Sie alle charakteristischen Punkte.

Lösung

a)

$D_f : \mathbb{R}$

$N : \Rightarrow \frac{1}{7}(2x^4 - x^2 - 1) = 0$

$$\begin{aligned}
2x^4 - x^2 - 1 = 0; \qquad y = x^2 \\
2y^2 - y - 1 = 0; \\
y^2 - \frac{1}{2}y - \frac{1}{2} = 0; \\
y_{1,2} = \frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{1}{2}} = \frac{1}{4} \pm \sqrt{\frac{9}{16}} = \frac{1}{4} \pm \frac{3}{4} \\
y > 0 (= x^2) \qquad \Rightarrow \quad y = 1 \qquad x = \pm 1.
\end{aligned}$$

$N : x = \pm 1$

b) Kritische Punkte (KP)
$f'(x) = \frac{1}{7}(8x^3 - 2x) = 0$

$$8x^3 - 2x = 0$$
$$4x^3 - x = 0$$
$$x(4x^2 - 1) = 0 \qquad \Rightarrow x_1 = 0, \qquad x_{2,3} = \pm\frac{1}{2} \qquad (KP).$$

$f''(x) = \frac{1}{7}(24x^2 - 2)$

$$f''(0) = -\frac{2}{7} < 0 \qquad Maximum$$
$$f''(\pm\frac{1}{2}) = \frac{4}{7} > 0 \qquad Minimum$$

c) Wendepunkte (WP)
$f''(x) = 0$

$$\Rightarrow \qquad 24x^2 - 2 = 0$$
$$x^2 = \frac{1}{12}$$
$$x_{1,2} = \pm\frac{1}{2\sqrt{3}} \qquad (WP)$$

d)