Universität Ulm
Institut für Theoretische Chemie

Prof. Dr. Gerhard Taubmann
Christian Mosch
Sebastian Schnur

# Mathematische Methoden II für Biochemie und Molekulare Medizin
# Mi 13-15 N25/568 (BioChem), Mi 14-16 N24/131 (MolMed)
# Übungsblatt 4, verteilt 9.5.2007, Übung 16.5.2007

Die Übungsblätter können von `http://www.uni-ulm.de/theochem/lehre` heruntergeladen werden.

**Aufgabe 1:** *Integration mit Kugelkoordinaten*

Integrieren Sie die Funktion

$$f(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{x^2+y^2+z^2}}$$

über die Kugelschale, deren innerer Radius 0.5 und deren äußerer Radius 1 beträgt.

**Aufgabe 2:** *Fourier-Transformation*

Gegeben sei die Funktion

$$f(t) = \begin{cases} \sqrt{\pi/2} & \text{für} \quad (-1 \le t \le +1) \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Berechnen Sie folgendes Integral:

$$f(\omega) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)\, e^{-i\omega t}\, dt\ .$$

Hinweis: Behandeln Sie $i$ während der Integration wie eine ganz normale Variable.

**Aufgabe 3:** *Partielle Integration, Substitution, Partialbruchzerlegung*

Berechnen Sie die folgenden Integrale:

(a) $\displaystyle\int \frac{1}{(A-ax)(B-bx)}\, dx$ (b) $\displaystyle\int_3^4 \frac{x^2+x+1}{2x^2-x-6}\, dx$

(c) $\displaystyle\int \sin(x)e^x\, dx$ (d) $\displaystyle\int x\ln(x^2)\, dx$

**Aufgabe 4:** *Linienintegral*

Kurze Übersicht zu Kurven- bzw. Wegintegralen (siehe Skript Seite 199 bis 212):

- Es sei $\vec{\gamma}(t) : [a,b] \to \mathbb{R}^n$ der mittels $t \in [a,b]$ parametrisierte Ortsvektor eines stückweise stetig differenzierbaren Weges der vom Anfangspunkt $\vec{\gamma}(a)$ bis zum Endpunkt $\vec{\gamma}(b)$ führt.
- Kurvenintegral 1. Art (die Funktion $f$ ist eine Zahl, kein Vektor): Das Wegintegral einer Funktion $f(\vec{r})$ entlang des Weges $\vec{\gamma}(t)$ ist definiert als $\int_\gamma f ds := \int_a^b f(\vec{\gamma}(t))|\dot{\vec{\gamma}}(t)|dt$. Hierbei wird die Parametrisierung des Weges $\vec{\gamma}(t)$ einfach in $f(\vec{r})$ eingesetzt. $\dot{\vec{\gamma}}(t)$ ist die komponentenweise Ableitung von $\vec{\gamma}(t)$ nach $t$, d.h. $|\dot{\vec{\gamma}}(t)|$ besagt, wie schnell sich $\vec{\gamma}(t)$ mit $t$ ändert. Beispiel: Berechnung der mittleren Höhe einer Radtour.
- Kurvenintegral 2. Art (nun ist $\vec{f}$ ein Vektor): Das Wegintegral einer Vektorfunktion $\vec{f}(\vec{r})$ entlang von $\vec{\gamma}(t)$ ist definiert als $\int_\gamma \vec{f} \cdot d\vec{s} := \int_a^b \vec{f}(\vec{\gamma}(t)) \cdot \dot{\vec{\gamma}}(t)\, dt$. Hier muss das Skalarprodukt aus $\vec{f}(\vec{\gamma}(t))$ und $\dot{\vec{\gamma}}(t)$ gebildet werden. $\dot{\vec{\gamma}}(t)$ ist ein Vektor, der tangential, d.h. parallel, am Weg anliegt. Daher entsteht durch einen senkrecht zum Weg stehenden Vektor $\vec{f}(\vec{\gamma}(t))$ kein Beitrag zum Integral, jedoch ein parallel zum Weg liegender Vektor $\vec{f}(\vec{\gamma}(t))$ trägt maximal bei. Beispiel: Durch Wind verursachter zusätzlicher Benzinverbrauch eines Autos: Direkter Seitenwind wirkt sich nicht aus, Rückenwind verringert ihn, Wind von vorne erhöht ihn.

- Begriffsklärung: Der Gradient (mathematisches Symbol $\nabla$ oder auch *grad*) einer skalaren Funktion $F(\vec{r})$ ist ein Vektor, der aus den partiellen Ableitungen der Funktion besteht. Allgemein: $\text{grad}(F(\vec{r})) = \begin{pmatrix} \partial F/\partial r_1 \\ \dots \\ \partial F/\partial r_n \end{pmatrix}$. Beispiel in 2D: $\text{grad}(F(x,y)) = \begin{pmatrix} \partial F/\partial x \\ \partial F/\partial y \end{pmatrix}$. Der Gradient zeigt immer in die Richtung, in der die Funktion $F(\vec{r})$ am stärksten anwächst. Mit anderen Worten: Er zeigt den Berg hinauf.
- Zusammenhang mit dem totalen Differential: Ist ein Vektorfeld $\vec{F}(\vec{r})$ darstellbar als Gradient eines skalaren Feldes $V$, also $\vec{F}(\vec{r}) = \nabla V(\vec{r}) = \text{grad}(V(\vec{r}))$, so ergibt sich für den Weg $\vec{\gamma}(t)$ mit Hilfe der Kettenregel: $\frac{d}{dt}V(\vec{\gamma}(t)) = \frac{d}{dt}V(\gamma_1(t), \gamma_2(t), \dots) = \frac{\partial V}{\partial r_1}\frac{d\gamma_1}{dt} + \frac{\partial V}{\partial r_2}\frac{d\gamma_2}{dt} + \dots = \nabla V(\vec{\gamma}(t)) \cdot \dot{\vec{\gamma}}(t) = \vec{F}(\vec{\gamma}(t)) \cdot \dot{\vec{\gamma}}(t)$. Erklärung dieser Rechnung: $\frac{d}{dt}V$ untersucht die Reaktion von $V$ auf eine Änderung von $t$. Da $t$ nur über $\vec{\gamma}$ eingeht, und zwar in jeder einzelnen Koordinate von $V$, besteht die Reaktion aus der Summe der Einzelreaktionen und zusätzlich ist die Kettenregel bezüglich der inneren Funktion $\vec{\gamma}$ anzuwenden. Und dies kann man schliesslich sehr kurz mit Hilfe des Gradienten und des Skalarproduktes schreiben. Man erhält so die Wegunabhängigkeit der Kurvenintegrale 2. Art, wenn deren Argument Gradientenfelder sind: $\int_\gamma \vec{F} \cdot d\vec{s} = \int_a^b \vec{F}(\vec{\gamma}(t)) \cdot \dot{\vec{\gamma}}(t)\, dt = \int_a^b \frac{d}{dt}V(\vec{\gamma}(t))\, dt = V(\vec{\gamma}(b)) - V(\vec{\gamma}(a))$. Mit anderen Worten: Wenn als Integrationsargument ein Gradientenfeld vorliegt, d.h. Wegunabhängigkeit besteht, dann und nur dann kann man eine eindeutige Stammfunktion angeben. Diese Stammfunktionen sind bezüglich ihrer Bedeutung mit denen vergleichbar, die Sie bereits aus der eindimensionalen Integration her kennen. Und natürlich kann $V$ auch in Form eines totalen Differentials vorliegen: $dV = \frac{\partial V}{\partial x}dx + \frac{\partial V}{\partial y}dy = \nabla V \cdot d\vec{r} = \vec{F} \cdot d\vec{r}$. Sollte kein totales Differential vorliegen, kann man die Integrationsregeln $\int_a^b \vec{F}(\vec{\gamma}(t)) \cdot \dot{\vec{\gamma}}(t)\, dt$ weiterhin anwenden, die Wegunabhängigkeit ist dann allerdings nicht mehr gegeben. Beispiel für Wegunabhängigkeit der Arbeit: Bahnkurve eines Raumschiffs im Kraftfeld eines Planeten (unter Vernachlässigung von Reibung, Wärme und weiteren Himmelskörpern).
- Neben diesen Integralen gibt es noch solche, die nicht an der *direkten* Fläche unter der Funktion entlang des Weges interessiert sind, sondern nur an der Projektion dieser Fläche auf eine der Ebenen, die von jeweils einer Koordinatenachse und der Funktionswertachse gebildet werden, z.B. an $\int_C f(x,y)dx = \int_C f(x, y(x))dx = \int_C f(x(t), y(t))\frac{dx}{dt}dt$ oder an $\int_C f(x(y), y)dy$. Diese Integrale unterscheiden sich von den vorher betrachteten dadurch, dass sie nicht die wirkliche Länge der Wegstücke $\vec{\gamma}$ berücksichtigen, sondern nur deren Projektion auf die jeweilige Koordinatenachse. Die Funktionswerte werden natürlich nach wie vor entlang des Wegs $\vec{\gamma}$ entnommen. Hierbei muss der Weg $\vec{\gamma}$ in eine Abhängigkeit $y(x)$ bzw. $x(y)$ gebracht werden. Beispiel: Arbeit bei der Zustandsänderung eines Gases (siehe Skript). Eine Abbildung, die diese Projektion veranschaulicht, finden Sie unter dem Punkt „Kurvenintegral“ auf `http://bilderbuch.wpavel.de` (unbedingt mit dem Text vergleichen).

Berechnen Sie nun die Kurvenintegrale folgender Funktionen, wobei die Kurve C entlang des Dreiecks von (0,0) nach (1,0) nach (0,1) und wieder zu (0,0) verläuft:

(a) $\oint_C (x+y)ds$ (b) $\oint_C \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot d\vec{s}$ (c) $\oint_C (xdx + ydy)$ (d) $\oint_C (xydx + xdy)$ (e) $\oint_C (x+y)dx$