Mathematik und Statistik für Molekularbiologen

Taylorreihen, Funktionen mehrerer Veränderlicher

Stefan Boresch

stefan@mdy.univie.ac.at, http://www.mdy.univie.ac.at/en/sbhome.html

Molecular Dynamics and Biomolecular Simulation Group,

Institut für Theoretische Chemie und Molekulare Strukturbiologie,

Universität Wien, Währingerstraße 17, 1090 Wien, Austria

26. Januar 2009

ENTWURF

Inhaltsverzeichnis

6 Taylorreihen, Potenzreihen

6.1 Herleitung und Definition

Wir beginnen mit einem Beispiel und betrachten folgendes, ins Unendliche fortgesetzte Polynom:

$$p(x) = 1 + x + \frac{x^2}{1\cdot 2} + \frac{x^3}{1\cdot 2\cdot 3} + \frac{x^4}{1\cdot 2\cdot 3\cdot 4} + \dots$$

Als nächstes berechnen wir die Ableitung

$$p'(x) = 0 + 1 + \frac{2x}{1\cdot 2} + \frac{3x^2}{1\cdot 2\cdot 3} + \frac{4x^3}{1\cdot 2\cdot 3\cdot 4} + \dots$$

Kürzt und vereinfacht man, so sieht man, daß

$$p'(x) = 1 + x + \frac{x^2}{1\cdot 2} + \frac{x^3}{1\cdot 2\cdot 3} + \dots = p(x)$$

gilt. Das Polynom $p(x)$ hat daher die gleiche Eigenschaft wie die Exponentialfunktion, für die ja ebenfalls gilt, daß $(e^x)' = e^x$. Das Verhalten von $p(x)$ suggeriert, ob nicht die ersten Terme näherungsweise zur Berechnung von e^x herangezogen werden können. Ein paar numerische Experimente sind in der folgenden Tabelle zusammengefaßt:

x	e^x	$1+\dots+\frac{x^3}{3!}$	$1+\dots+\frac{x^6}{6!}$	$1+\dots+\frac{x^{17}}{17!}$
-3.0	0.04979	-2.00000	0.36250	0.04979
0.1	1.10517	1.10517	1.10517	1.10517
1.1	3.00417	2.92683	3.00372	3.00417
5.2	181.272	43.1547	132.763	181.271

Die Einträge in der obigen Tabelle zeigen, daß das unendliche Polynom $p(x)$ tatsächlich zur numerischen Berechnung der Exponentialfunktion verwendet werden kann, wenngleich in Abhängigkeit vom Argument x rasch recht viele Terme für eine akzeptable Genauigkeit notwendig sind.

Eine Zwischenbemerkung zur Nomenklatur. $p(x)$ des obigen Beispiels ist nicht nur (ein ins Unendliche fortgesetztes) Polynom, sondern auch ein Beispiel einer (unendlichen) Reihe (einer sogenannten Potenzreihe). Eine *Reihe* ist der mathematische Terminus technicus für eine Summe, deren Glieder bestimmten Gesetzmäßigkeiten gehorchen. Im $p(x)$ Beispiel ist das n-te Glied der Reihe (und somit der Summe bzw. des Polynoms) durch $x^n/n!$ gegeben.

Polynome sind eine "angenehme" Klasse von Funktionen, sie sind leicht (und effizient) zu berechnen (Hornerschema), leicht zu differenzieren und zu integrieren. Das einführende Beispiel lässt weiters vermuten, daß "unendliche" Polynome dazu verwendet werden könn(t)en, beliebige Funktionen darzustellen bzw. indem man nur endlich viele Terme verwendet diese anzunähern. Ein allgemeines Polynom hat die Form

$$P(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3 + \dots$$

Ganz offensichtlich bestimmt die Wahl der Koeffizienten a_0, a_1 usw. die Eigenschaften von $P(x)$. In unserem Beispiel mit der Exponentialfunktion sind $a_0 = 1$, $a_1 = 1$, $a_2 = 1/2$, $a_3 = 1/(1{\cdot}2{\cdot}3) = 1/3!$, und allgemein $a_n = 1/n!$. (Das Rufzeichen bedeutet die *Fakultät*, $n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \ldots \cdot n$.)

Um die folgenden Ableitungen so allgemein wie möglich zu halten, verwenden wir eine noch allgemeinere Form des Polynoms

$$\tilde{P}((x-x_0)) = a_0 + a_1(x-x_0) + a_2(x-x_0)^2 + a_3(x-x_0)^3 + \ldots,$$

dies entspricht einer Verschiebung des Ursprungs um x_0. Wir wollen im folgenden zeigen, daß Funktionen tatsächlich als Polynome dargestellt werden können, vorausgesetzt wir kennen Funktionswerte und Ableitungswerte an einem bestimmten Punkt x_0.

$$f(x) = A + B\,(x-x_0) + C\,(x-x_0)^2 + D\,(x-x_0)^3 + E\,(x-x_0)^4 + \ldots \tag{1}$$

Die Frage ist nur, wie man die Koeffizienten A, B usw. bestimmt, sodaß Gl. 1 zutrifft. Aus $f(x_0) = A$ folgt $A = f(x_0)$. Dazu differenzieren wir mehrmals

$$\begin{array}{rcccccccc} f'(x) & = & B + 2\,C(x-x_0) & + & 3\,D(x-x_0)^2 & + & 4\,E(x-x_0)^3 & + & \ldots \\ f''(x) & = & 2\,C & + & 3\cdot 2\,D(x-x_0) & + & 4\cdot 3\,E(x-x_0)^2 & + & \ldots \\ f'''(x) & = & & & 3\cdot 2\,D & + & 4\cdot 3\cdot 2\,E(x-x_0) & + & \ldots \\ & & & & \text{usw.} & & & & \end{array}$$

Kennt man jetzt (wie vorausgesetzt) die Werte der Ableitung an der Stelle x_0, d.h., $f'(x_0)$, $f''(x_0)$, $f'''(x_0)$ usw., so findet man sofort

$$\begin{array}{rcccc} B & = & f'(x_0) & = & \dfrac{f'(x_0)}{1!} \\ C & = & \dfrac{f''(x_0)}{2\cdot 1} & = & \dfrac{f''(x_0)}{2!} \\ D & = & \dfrac{f'''(x_0)}{3\cdot 2\cdot 1} & = & \dfrac{f'''(x_0)}{3!} \\ & & \text{usw.} & & \end{array}$$

Man bezeichnet eine Reihendarstellung der Form

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}\,(x-x_0) + \frac{f''(x_0)}{2!}\,(x-x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}\,(x-x_0)^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x-x_0)^n + \ldots \tag{2}$$

als Taylorentwicklung (Taylorreihe) der Funktion $f(x)$ um den (Entwicklungs)Punkt x_0. Den Spezialfall $x_0 = 0$, der auf

$$f(x) = f(0) + \frac{f'(0)}{1!}\,x + \frac{f''(0)}{2!}\,x^2 + \frac{f'''(0)}{3!}\,x^3 + \ldots + \frac{f^{(n)}(0)}{n!}x^n + \ldots \tag{3}$$

führt, bezeichnet man auch als MacLaurinreihe (-darstellung) der Funktion $f(x)$.

Bevor wir die Frage beantworten, ob diese Darstellung möglich ("erlaubt") ist, berechnen wir sie ganz einfach für ein paar Beispiele. Gesucht ist jeweils die Reihendarstellung um den angegebenen Entwicklungspunkt.

1. $e^x =$ $(x_0 = 0)$: Man geht am besten in Form einer Tabelle vor. Zur Erinnerung: Die Notation $f^{(0)}(x)$, also die "nullte Ableitung" ist die Funktion $f(x)$ selbst.

k	$f^{(k)}(x)$	$f^{(k)}(x_0)$	$a_k = f^{(k)}(x_0)/k!$
0	e^x	1	1
1	e^x	1	1
2	e^x	1	1/2
3	e^x	1	1/6

und somit finden wir für

$$e^x = 1 + x + x^2/2 + x^3/6 + \dots \tag{4}$$

in Übereinstimmung mit dem anfänglichen Beispiel.

2. $\sin x =$ $(x_0 = 0)$: Man geht in völliger Analogie zu Beispiel 1 vor:

k	$f^{(k)}(x)$	$f^{(k)}(x_0)$	$a_k = f^{(k)}(x_0)/k!$
0	$\sin x$	0	0
1	$\cos x$	1	1
2	$-\sin x$	0	0
3	$-\cos x$	-1	$-1/6$
4	$\sin x$	0	0
5	$\cos x$	1	1/120
6	$-\sin x$	0	0

Daraus ergibt sich die MacLaurinreihe für die Sinusfunktion als

$$\sin x = x - x^3/6 + x^5/120 \pm \dots \tag{5}$$

3. $\sin x =$ $(x_0 = \pi/4)$: Wiederum analog zum vorherigen Beispiel, aber $f^{(k)}(x_0)$ ändert sich:

k	$f^{(k)}(x)$	$f^{(k)}(x_0)$	$a_k = f^{(k)}(x_0)/k!$
0	$\sin x$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/2$
1	$\cos x$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/2$
2	$-\sin x$	$-\sqrt{2}/2$	$-\sqrt{2}/4$
3	$-\cos x$	$-\sqrt{2}/2$	$-\sqrt{2}/12$
4	$\sin x$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/48$
5	$\cos x$	$\sqrt{2}/2$	$\sqrt{2}/240$

Daraus ergibt sich die Taylorreihe der Sinusfunktion für $x_0 = \pi/4$ als

$$\sin x = \frac{\sqrt{2}}{2} + \frac{\sqrt{2}}{2}(x - \frac{\pi}{4}) - \frac{\sqrt{2}}{4}(x - \frac{\pi}{4})^2 - \frac{\sqrt{2}}{12}(x - \frac{\pi}{4})^3 + \frac{\sqrt{2}}{48}(x - \frac{\pi}{4})^4 \pm \dots \tag{6}$$

Die Reihendarstellung wichtiger Funktionen, vor allem für $x_0 = 0$, finden sich in allen besseren Formelsammlungen. In der Praxis bedient man sich dieser "Fertigformeln" und leitet nicht jedesmal von neuem ab.

6.2 Anmerkungen zum Gültigkeitsbereich

Taylor- und MacLaurinreihen sind nützliche Werkzeuge, und Sie können davon ausgehen, daß Gln. 2 bzw. 3 ihre Berechtigung haben. Allerdings ist eine Taylorentwicklung um einen Punkt x_0 nicht immer für beliebige Werte von x gültig. Um den Gültigkeitsbereich von Taylorreihen zu bestimmen, muß man sich mit dem Konvergenzverhalten der Reihe beschäftigen, wir haben hierfür nicht genug Zeit, und es sei nicht verheimlicht, daß derartige Untersuchungen nicht immer einfach sind. Es wurde schon erwähnt, daß wichtige Taylor- und v.a. MacLaurinreihen in Formelsammlungen zu finden sind. Diese Tabellen enthalten immer den Gültigkeitsbereich der jeweiligen Reihe in Form des sogenannten *Konvergenzradius*. Anwendung einer Taylorreihe für Werte von x außerhalb des Gültigkeitsbereichs der Darstellung ist eine "Todsünde" — eine derartige Rechnung (Anwendung) ist schlichtweg Unsinn (ähnlich einer Division durch Null)! Schlagen wir in einer Formelsammlung nach, z.B. [Bartsch S. 195ff]. Wir finden z.B. auf S. 175 unten die MacLaurinreihe der Funktion

$$f(x) = (1 \pm x)^{1/2} = 1 \pm \frac{1}{2}x - \frac{1 \cdot 1}{2 \cdot 4}x^2 \pm \frac{1 \cdot 1 \cdot 3}{2 \cdot 4 \cdot 6}x^3 \ldots$$

plus der Angabe, daß diese Darstellung für $|x| \leq 1$ anwendbar ist. Gleich darunter finden wir die Reihe für

$$f(x) = (1 \pm x)^{-1} = 1 \mp x + x^2 \mp x^3 \ldots,$$

diese Reihe ist allerdings nur für $|x| < 1$ gültig.[1] Diese beiden Reihen sind Beispiele von MacLaurinreihen, die nur innerhalb eines bestimmten Konvergenzradius gültig sind. Es gibt allerdings viele Funktionen, u.a. e^x, $\sin x$ und $\cos x$ deren Reihendarstellungen für alle $x \in \mathbb{R}$ verwendbar ist.

Abschließend sei noch angemerkt, daß für die meisten Funktionen präferentiell die MacLaurinreihe verwendet wird (also Entwicklung um $x_0 = 0$). Die große Ausnahme ist der Logarithmus, der an der Stelle 0 nicht definiert ist. Für $\ln x$ verwendet man daher z.B. die Taylorreihe an der Stelle $x_0 = 1$ [Bartsch S. 196]

$$\ln x = (x-1) - \frac{(x-1)^2}{2} + \frac{(x-1)^3}{3} \ldots \qquad 0 < x \leq 2.$$

6.3 Rechnen mit Potenzreichen

Taylorreihen (MacLaurinreihen) sind Spezialfälle von unendlichen Potenzreihen[2] der allgemeinen Form

$$A + B\,(x-x_0) + C\,(x-x_0)^2 + \ldots = a_0 + a_1\,(x-x_0) + a_2\,(x-x_0)^2 + \ldots = \sum_{i=0}^{\infty} a_i\,(x-x_0)^i. \quad (7)$$

Solange eine Potenzreihe absolut konvergent ist, darf Sie in vielfältiger Weise manipuliert werden. Diese Voraussetzung, auf die wir hier nicht weiter eingehen können, ist automatisch erfüllt,

[1] Es sind diese kleinen Feinheiten (Unterschied zw. $|x| \leq 1$ und $|x| < 1$), die die Bestimmung von Konvergenzradien nichttrivial machen.

[2] Dies schlägt sich auch unglücklicherweise in Formelsammlungen nieder: Die Definition von Taylor- und MacLaurinreihen finden Sie meist im Kapitel "Differentialrechnung", Tabellen mit speziellen (MacLaurin) Reihen und sonstige Informationen hingegen im Abschnitt "Potenzreihen".

wenn wir Potenzreihen nur innerhalb ihres Konvergenzradius verwenden. Derartige Manipulationen sind u.a. ein wichtiges Hilfsmittel zur raschen Gewinnung von Taylor- und MacLaurinreihen als mittels der Definition Gl. 2 möglich wäre. In manchen Fällen stellt diese Vorgehensweise sogar den einzig praktikablen Weg dar.[3]

Der folgende Überblick beschränkt sich der Einfachheit halber auf MacLaurinreihen, oder allgemeiner Potenzreihen der Form:

$$A + B\,x + C\,x^2 + \ldots = a_0 + a_1\,x + a_2\,x^2 + \ldots = \sum_{i=0}^{\infty} a_i\,x^i. \tag{8}$$

1) Zwei Potenzreichen werden addiert bzw. subtrahiert, indem man die einzelnen Glieder addiert (subtrahiert). Es gilt

$$(a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots) + (b_0 + b_1 x + b_2 x^2 + \ldots) = (a_0 + b_0) + (a_1 + b_1)x + (a_1 + b_1)x^2 + \ldots \tag{9}$$

bzw.

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i + \sum_{i=0}^{\infty} b_i x^i = \sum_{i=0}^{\infty} (a_i + b_i) x^i.$$

An dieser Stelle gleich eine Anmerkung: Die Wichtigkeit des Konvergenzradius wurde im vorherigen Abschnitt betont. Wie sieht es mit dem Gültigkeitsbereich einer Potenzreihe (MacLaurinreihe) aus, die sich aus zwei Potenzreihen wie z.B. in Gl. 9 zusammensetzt? Im Prinzip muß der Konvergenzradius der resultierenden Reihe erneut untersucht werden. Wir beschränken uns hier auf folgende "Faustregel": Der kleinere Konvergenzradius "gewinnt", d.h., der Konvergenzradius der resultierenden Reihe kann nicht größer sein als der kleinere der Ausgangsreihen. Diese Faustregel ist die obere Grenze des resultierenden Konvergenzradius, dieser kann (z.B. bei verschachtelten Funktionen, s.u.) auch kleiner sein.

Als Anwendung beweisen wir die Eulersche Formel $e^{ix} = \cos x + i \sin x$: Die Reihen für e^x (Gl. 4) und $\sin x$ (Gl. 5) haben wir bereits abgeleitet, die Reihe $\cos x = 1 - x^2/2 + x^4/24 \pm \ldots$ entnehmen wir der Formelsammlung (z.B. [Bartsch S. 196]. Mit Gl. 4 und $t = ix$ erhält man ausgehend von der linken Seite der Eulerschen Formel

$$e^{ix} = e^t = 1 + t + \frac{t^2}{2} + \frac{t^3}{6} + \frac{t^4}{24} + \frac{t^5}{120} + \ldots = 1 + ix + \frac{(ix)^2}{2} + \frac{(ix)^3}{6} + \frac{(ix)^4}{24} + \frac{(ix)^5}{120} + \ldots =$$

$$= 1 + ix - \frac{x^2}{2} - i\frac{x^3}{6} + \frac{x^4}{24} + i\frac{x^5}{120} + \ldots = \underbrace{1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \ldots}_{\cos x} + i\big(\underbrace{x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120}}_{\sin x}\big) = \cos x + i \sin x$$

Damit ist die Eulersche Formel bewiesen (oder zumindestens plausibel gemacht — für einen exakten Beweis müssten wir zeigen, daß die Differentiationsregeln für die imaginäre Zahl ix unverändert bleiben)

2) Absolut konvergente Potenzreihen können gliedweise multipliziert werden. In der Praxis

[3] Um zu sehen was gemeint ist, versuchen Sie die ersten vier nichtverschwindenden Terme der MacLaurinreihe für $f(x) = \sin(x^2)$ zu bestimmen.

ist nur eine gewisse Buchhaltung nötig:

$$
\begin{array}{l}
e^x \sin x = \\
\begin{array}{ccccccccccc}
(1 & + & x & + & \frac{x^2}{2} & + & \frac{x^3}{3} & + & \frac{x^4}{24} & + \dots &) \times (\; x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \dots) \\
\hline
x & + & x^2 & + & \frac{x^3}{2} & + & \frac{x^4}{6} & + & \frac{x^5}{24} & + \dots & \\
 & & & - & \frac{x^3}{6} & - & \frac{x^4}{6} & - & \frac{x^5}{12} & + \dots & \\
 & & & & & & & + & \frac{x^5}{120} & + \dots & \\
\hline
x & + & x^2 & + & \frac{x^3}{3} & + & 0 & - & \frac{x^5}{30} & + \dots &
\end{array}
\end{array}
$$

3) Die Division zweier Potenzreihen erfolgt durch den *Ansatz mit unbestimmten Koeffizienten*. Als Beispiel (auch wenn in den meisten Formelsammlungen vorhanden) berechnen wir die MacLaurinreihe für den Tangens.

$$\tan x = \frac{\sin x}{\cos x} = c_0 + c_1\, x + c_2\, x^2 + \dots$$

Die Reihen für Sinus und Cosinus sind bekannt, und auf diese Weise erhält man

$$\sin x = (c_0 + c_1\, x + c_2\, x^2 + \dots) \times \cos x \qquad \text{(A)}$$

$$\underbrace{x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \dots}_{\sin x} = \underbrace{(c_0 + c_1\, x + c_2\, x^2 + \dots)}_{\tan x} \times \underbrace{\left(1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \dots\right)}_{\cos x} \qquad \text{(B)}$$

Man multipliziert nun die rechte Seite aus, und sortiert nach Potenzen von x.

$$
\begin{array}{cccccccccl}
(c_0 + c_1 x + & c_2 x^2 & + & c_3 x^3 & + & c_4 x^4 & + & c_5 x^5 & + \dots) & \times (1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} \dots) \\
\hline
c_0 + c_1 x + & c_2 x^2 & + & c_3 x^3 & + & c_4 x^4 & + & c_5 x^5 & + \dots & \\
 & \frac{c_0}{2} x^2 & - & \frac{c_1}{2} x^3 & - & \frac{c_2}{4} x^4 & - & \frac{c_3}{2} x^5 & + \dots & \\
 & & & & + & \frac{c_0}{24} x^4 & + & \frac{c_1}{24} x^5 & + \dots & \\
\hline
\end{array}
$$

$$c_0 + c_1 x + \left(c_2 - \tfrac{c_0}{2}\right) x^2 + \left(c_3 - \tfrac{c_1}{2}\right) x^3 + \left(c_4 - \tfrac{c_2}{2} + \tfrac{c_0}{24}\right) x^4 + \left(c_5 - \tfrac{c_3}{2} + \tfrac{c_1}{24}\right) x^5 + \dots \qquad \text{(C)}$$

Jetzt vergleicht man die bekannten Koeffizienten der Sinusreihe (linke Seite in (B) mit dem Ergerbnis von (C), das die zu bestimmenden unbekannten Koeffizienten enthält. Man findet:

$$
\begin{array}{rcl}
0 & = & c_0 \\
1 & = & c_1 \\
0 & = & c_2 - \dfrac{c_0}{2} \\
-\dfrac{1}{6} & = & c_3 - \dfrac{c_1}{2} \\
0 & = & c_4 - \dfrac{c_2}{2} + \dfrac{c_0}{24} \\
+\dfrac{1}{120} & = & c_5 - \dfrac{c_3}{2} + \dfrac{c_1}{24} \\
 & \text{usw.} & \qquad \text{(D)}
\end{array}
$$

Daraus erhält man nach kurzer Rechnung die Koeffizienten und somit die MacLaurinreihe für den Tangens,

$$\tan x = x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \dots$$

(Dies ist ein Fall, wo der Konvergenzradius der resultierenden Reihe "deutlich" kleiner ist als der der Ausgangsreihen — obwohl die Reihen für Sinus und Cosinus für alle $x \in \mathbb{R}$ gültig sind, ist der Konvergenzradius des Tangens $|x| < \pi/2$.[4]

4) Die vielleicht nützlichste Regel in Hinblick auf die Gewinnung neuer MacLaurinreihen betrifft verknüpfte Funktionen, wir illustrieren dies an einem einfachen Beispiel: Gesucht sei die MacLaurinreihenentwicklung von $f(x) = \sin(x^2)$. Man schreibt jetzt $u = x^2$ und beginnt mit der Reihenentwicklung von $\sin u$ (Formelsammlung):

$$\sin u = u - \frac{u^3}{3!} + \frac{u^5}{5!} - \frac{u^7}{7!} \pm \dots$$

In diese Reihe setzt man jetzt mit $u = x^2$ ein, und erhält mühelos

$$\sin(x^2) = x^2 - \frac{x^6}{3!} + \frac{x^{10}}{5!} - \frac{x^{14}}{7!} \pm \dots$$

Der Ausdruck für u muß kein Ausdruck mit nur endlich vielen Gliedern sein, wie in obigen Beispiel. Z.B. für $f(x) = e^{\sin x}$ startet man mit

$$e^u = 1 + u + \frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{3!} + \dots$$

und setzt dann auf der rechten Seite für $u = \sin x = x - x^3/3! + x^5/5! \pm \dots$ ein. Die Vereinfachung des resultierenden Ausdrucks wird allerdings rasch ziemlich mühsam.

5) Absolut konvergente Potenzreihen dürfen gliedweise differenziert und integriert werden. Aus der Formelsammlung ([Bartsch S. 195]) entnehmen wir

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \dots \qquad |x| < 1$$

Durch Differenzieren der linken und rechten Seite finden wir sofort die Potenzreihendarstellung von $(1-x)^{-2}$

$$\frac{1}{(1-x)^2} = 1 + 2x + 3x^2 + \dots \qquad |x| < 1$$

mit gleichem Konvergenzradius.

Im Kapitel über Integration haben wir festgestellt, daß wir Funktionen wie e^{x^2}, $\sin(x^2)$ und $\cos(x^2)$ keine Stammfunktionen finden können, obwohl diese existieren müssen. Die Potenzreihendarstellungen (MacLaurinreihen) dieser Stammfunktionen kann man jedoch sofort durch gliedweise Integration erhalten. Gesucht sei z.B.

$$\int dx\, e^{x^2}$$

[4] Dies ist natürlich nicht wirklich überraschend, denn für $x = \pm\pi/2$ wird der Nenner 0!

Wir bestimmen zunächst die MacLaurinreihe für e^{x^2}. Mit $u = x^2$ finden wir

$$e^{x^2} = e^u = 1 + u + \frac{u^2}{2} + \frac{u^3}{3!} + \ldots = 1 + x^2 + \frac{x^4}{2} + \frac{6}{3!} + \ldots$$

und daraus sofort

$$\int dx\, e^{x^2} = \int dx\, (1 + x^2 + \frac{x^4}{2} + \frac{x^6}{3!} + \ldots) = x + \frac{x^3}{3} + \frac{x^5}{10} + \frac{x^7}{42} + \ldots$$

6.4 Zur Verwendung von Taylorreihen

Taylorreihen vermitteln einerseits einen Einblick, was sogenannte *transzendentale* Funktionen (e^x, $\sin x$ usw.) eigentlich sind bzw. wie man Sie im Prinzip (näherungsweise[5]) berechnen könnte. Weiters tauchen Taylorreihen immer wieder in physikalischen, chemischen oder mathematischen Herleitungen auf, ohne daß dies speziell erwähnt wird. Besonders "beliebt" sind in diesem Zusammenhang die *lineare* Näherung, d.h.,

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0),$$

sowie die *quadratische* Näherung, d.h.,

$$f(x) \approx f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2} f''(x_0).$$

Letztere wird besonders dann verwendet, wenn $f'(x_0) = 0$. "Mutiert" in einer Herleitung z.B. ein e^x "für kleine x" in $1 + x$, so wurden die beiden ersten Glieder der MacLaurinreihe der Exponentialfunktion verwendet. Ähnliche Nährerungen (immer nur gültig für "kleine x") sind z.B. $\sin x \approx x$, $1/(1 + x) \approx 1 - x$ usw. (siehe auch z.B. [Bartsch S. 198]).

Taylorreihen lassen sich auch zur Grenzwertberechnung verwenden. Dies ist besonders dann nützlich, wenn man im Zuge der Grenzwertberechnung auf unbestimmte Ausdrücke der Form $\frac{0}{0}$ oder $\frac{\infty}{\infty}$ stößt. Beispiel:

$$\lim_{x\to 0} \frac{1 - \cos 2x}{e^{3x} - 1 - 3x} = \lim_{x\to 0} \frac{1 - \left(1 - \frac{4x^2}{2} + \frac{16x^4}{24} \ldots\right)}{\left(1 + 3x + \frac{9x^2}{2} \ldots\right) - 1 - 3x} =$$

$$= \lim x \to 0 \frac{x^2 \left(2 - \frac{16}{24} x^2 \ldots\right)}{x^2 \left(\frac{9}{2} + \frac{27}{6} x \ldots\right)} = \frac{4}{9}$$

Alternativ kann man natürlich auch die l'Hopitalsche Regel anwenden: Stößt man bei einer Grenzwertberechnung auf einen unbestimmten Ausdruck $\frac{0}{0}$ oder $\frac{\infty}{\infty}$, so kann differenziert man Zähler und Nenner so lange bis der Grenzwert berechnet werden kann oder klar ist, daß der Grenzwert nicht existiert. Für das obige Beispiel

$$\lim_{x\to 0} \frac{\overbrace{1 - \cos 2x}^{0}}{\underbrace{e^{3x} - 1 - 3x}_{0}} = \lim_{x\to 0} \frac{\overbrace{2 \sin 2x}^{0}}{\underbrace{3e^{3x} - 3}_{0}} = \lim_{x\to 0} \frac{4 \cos x}{9e^{3x}} = \frac{4}{9}.$$

[5] Näherungsweise deshalb, weil Sie immer nur endlich viele Terme berechnen können. In der numerischen Mathematik kennt man viele Tricks um die Konvergenz von Reihen zu beschleunigen. Mit beinahe an Sicherheit grenzender Wahrscheinlichkeit verwendet Ihr Taschenrechner*keine* Taylorreihen, um Sinus, Cosinus usw. zu berechnen, das Prinzip verdeutlichen sie aber nicht schlecht.

Die Grenzwertberechnung mittels Taylorreihen wird im Vergleich zur l'Hopitalschen Regel um so effizienter, je öfter man bei letzterer Zähler und Nenner differenzieren muß.

7 Anmerkungen zu Funktionen mehrerer Veränderlicher

Funktionen einer Veränderlichen, also unser "gewohntes" $f(x)$, sind in den Naturwissenschaften eher die Ausnahme denn die Regel. Es sei nochmals an das ideale Gasgesetz erinnert,

$$pV = nRT,$$

aus dem sich jede der vier Veränderlichen, Druck p, Volumen V, Molmenge n und Temperatur T, jeweils als Funktion der drei anderen Variablen ausdrücken läßt, z.B.

$$p = p(V, n, T) = \frac{nRT}{V}$$

usw. Ein weiteres Beispiel ist die molekularmechanische Beschreibung von Biomolekülen. Ein Protein besteht aus N Atomen. Jedes dieser Atome hat eine Position im Raum, (x_i, y_i, z_i). Die Gesamtenergie E des Proteins ist eine Funktion aller Atomkoordinaten, d.h.,

$$E = E(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \ldots, x_N, y_N, z_N)$$

ist eine Funktion von $3N$ Variablen, wobei N einige Hundert bis einige Tausend beträgt.

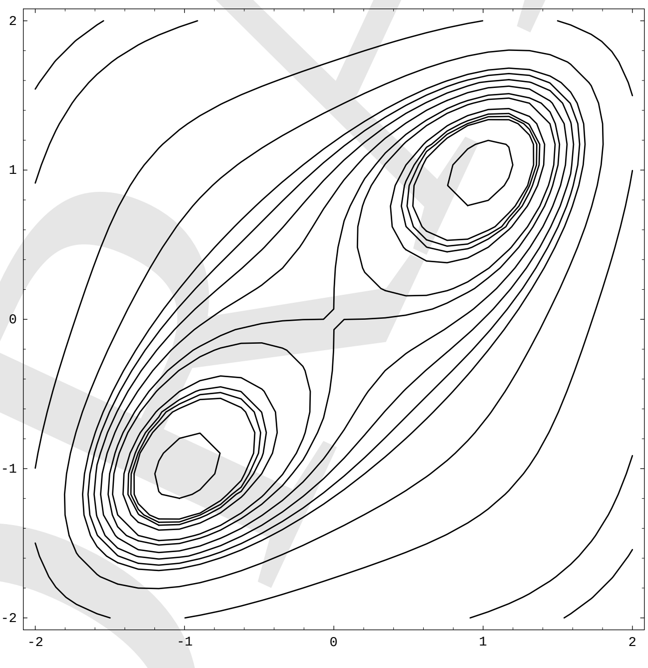

Abbildung 1: $f(x, y) = x^4 + y^4 - 4xy + 1$

Im folgenden werden wir uns hauptsächlich auf Funktionen zweier Veränderlicher beschränken, wobei in den meisten Punkten eine Verallgemeinerung auf drei oder mehrere Variablen problemlos möglich ist. Als Beispiel wird uns die Funktion

$$f(x, y) = x^4 + y^4 - 4xy + 1 \tag{10}$$

dienen. Funktionswerte berechnet man für ein Wertepaar (x, y) durch Einsetzen in die Funktionsgleichung. In unserem Beispiel ist daher $f(0,0) = 1$, $f(1,2) = 1^4 + 2^4 - 4 \times 1 \times 2 + 1 = 10$, $f(-1,1) = 7$ usw. Während das Ausrechnen von Funktionswerten kein Problem ist, ist die graphische Darstellung eine etwas größere Herausforderung. Für zwei Veränderliche kann man den Funktionswert $f(x, y)$ als z-Wert in einem dreidimensionalen kartesischen Koordinatensystem darstellen. Dies ist zwar optisch recht ansprechend, wird aber rasch unübersichtlich. Eine zweite Möglichkeit besteht in der Verwendung von Kontour- oder Höhenschichtlinien. Ähnlich wie in einer Landkarte die Punkte gleicher Höhe durch Linien verbunden werden, stellt man die Funktion durch Linien gleicher Funktionswerte dar. Für unsere Beispielsfunktion ist dies in Fig. 1 illustriert. Derartige Plots müssen wie Landkarten interpretiert werden. Man sieht also, daß bei $(-1,-1)$ und $(1,1)$ Maxima ("Gipfel") oder Minima ("Tal") vorliegen, und daß bei $(0,0)$ ein Übergang ("Sattel") zwischen diesen beiden Extremstellen vorliegt. Das systematische Finden von Maxima und Minima werden wir in Abschnitt 7.3 behandeln.

Ein wichtiger Unterschied zwischen Funktionen zweier Veränderlicher und Funktionen von mehr als zwei Veränderlichen besteht darin, daß in letzterem Fall keine einfache graphische Darstellung mehr möglich ist.

Bei Funktionen in einer Veränderlichen haben wir uns recht detailliert mit der Definitionsmenge und der Frage der Stetigkeit auseinandergesetzt. Die Prinzipien, die wir dort gefunden haben, behalten auch für mehrdimensionale Funktionen ihre Gültigkeit. Aus der Definitionsmenge sind alle jene Punkte (Variablenpaare, -tripel usw.) auszuschließen, die auf eine verbotene Operation führen würden oder den Funktionswert komplex machen würden. Z.B. für die Funktion $f(x, y, z) = \frac{x+y}{z}$ müssen alle (x, y, z)-Tripel mit $z = 0$ ausgeschlossen werden, um eine Division durch Null zu vermeiden. Der Begriff der Stetigkeit läßt sich anschaulich immer noch am besten durch das Adjektiv "glatt" charakterisieren. So ist z.B. die Funktion

$$f(x,y) = \begin{cases} x + y & x \neq 0 \text{ und } y \neq 0, \\ 5 & x = y = 0 \end{cases}$$

im Punkt $(0,0)$ unstetig, da die Funktion den Wert $f(x \to 0, y \to 0) \to 0$ anstrebt, im Punkt selbst aber auf $f(0,0) = 5$ springt. In dieser Betrachtung ist natürlich wieder ein Grenzwert verborgen. Zu Grenzwerten nur so viel: Prinzipiell ändert sich nichts gegenüber Grenzwerten für Funktionen einer Veränderlichen. Die Existenz eines Grenzwerts im mehrdimensionalen Fall bedingt jedoch zusätzlich, daß derselbe Wert angenommen wird, unabhängig von der Richtung aus der man sich dem fraglichen Punkt nähert. So strebt im obigen Beispiel der Funktionswert gegen 0, egal ob man zuerst $x \to 0$ gegen Null und dann $y \to 0$ gegen 0 gehen läßt, oder umgekehrt, usw. Da dieser Grenzwert $\lim_{\substack{x \to 0 \\ y \to 0}} [x + y] = 0$ nicht mit dem Funktionswert in diesem Punkt $f(0,0) = 5$ übereinstimmt, ist die Funktion in diesem Punkt jedoch nicht stetig.

7.1 Partielle Ableitungen

Untersucht man Funktionen mehrerer Veränderlicher ohne Plan, so wird man leicht "schwindlig". Der einfachste systematische Ansatz besteht darin, sich immer auf eine Variable zu konzentrieren, und die andere(n) Variable(n) konstant zu halten. Dies entspricht der experimentellen Praxis. Ist man an einer Reaktionsgeschwindigkeit als Funktion der Konzentration interessiert, so wird man alle anderen Bedingungen (Variablen), insbesondere die Temperatur konstant zu halten trachten. Will man hingegen die Reaktionsgeschwindigkeit als Funktion der Temperatur messen, so wird man immer mit den selben (Start)konzentrationen arbeiten.

Betrachten wir als Beispiel unsere Funktion Gl. 10 und setzen einmal $x = a$ und einmal $y = b$, wobei a und b beliebige Konstanten $\in \mathbb{R}$ seien (für diese Beispielsfunktion gibt es keinerlei Einschränkungen der Definitionsmenge).

$$\begin{aligned} f(x = a, y) &= f_1(y) = a^4 + y^4 - 4ay + 1 \\ f(x, y = b) &= f_2(x) = x^4 + b^4 - 4bx + 1 \end{aligned}$$

Wir erhalten zwei gewöhnliche eindimensionale Funktionen $f_1(y)$, $f_2(x)$, die jetzt ganz normal nach der jeweiligen Variablen x bzw. y abgeleitet werden können:

$$f_1'(y) = 4y^3 - 4a = f'(x = a, y)$$

$$f_2'(x) = 4x^3 - 4b = f'(x, y = b)$$

Die jeweils letzte Identität auf der rechten Seite soll andeuten, daß es sich bei $f_1'(y)$ auch um die Ableitung von $f(x, y)$ nach y handelt, wenn der x-Wert bei $x = a$ festhalten wird, und analog für $f_2'(x)$.

Es sei nochmals betont, daß wir keinerlei Einschränkungen bezüglich a und b gemacht haben. In diesem Sinn kann man a und b wieder durch x und y ersetzen, soferne man vereinbart, daß für die Durchführung der Ableitung diese jeweils nichtinteressierenden Variablen $x = a \in \mathbb{R}$, $y = b \in \mathbb{R}$ als konstant betrachtet werden. Diese Vorgehensweise führt auf das Konzept der *partiellen Ableitung*. Die partiellen Ableitungen in unserem Beispiel (Gl. 10 lauten daher:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} &= 4x^3 - 4y = f_x(x, y) = f_x \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} &= 4y^3 - 4x = f_y(x, y) = f_y \end{aligned}$$

Gegenüber den normalen Ableitungen ändert sich die Notation etwas. In der Leibnizschen Schreibweise ersatzt man das d in $\frac{d}{dx}$ durch das stilisierte ∂ und schreibt (für die partielle Ableitung nach x) $\frac{\partial}{\partial x}$, und an Stelle des $'$ in f' schreibt man als Subskript die Variable, nach der abgeleitet wird, z.B. f_y. Die praktische Rechenregel lautet: Man betrachte die nichtinteressierende Variable (die nichtinteressierenden Variablen) als Konstante, und leite ansonsten ganz gewöhnlich ab.

Im eindimensionalen Fall war die Interpretation der Ableitung die *Rate* der Änderung von $f(x)$ als Funktion von x. Die partielle Ableitung nach z.B. x einer Funktion $f(x, y, z, \ldots)$ kann als die Rate der Änderung von $f(x, y, z, \ldots)$ in Abhängigkeit von x bei konstantem y, z usw. aufgefasst werden. Etwas formaler läßt sich das durch folgende Definitionen (für den zweidimensionalen Fall) ausrücken:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} &= \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x, y) - f(x, y)}{\Delta x} \\ \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} &= \lim_{\Delta y \to 0} \frac{f(x, y + \Delta y) - f(x, y)}{\Delta y} \end{aligned} \tag{11}$$

7.2 Höhere partielle Ableitungen — Satz von Schwarz

Wir haben eben für unsere Beispielsfunktion Gl. 10, $f(x,y) = x^4 + y^4 - 4xy + 1$, die partiellen Ableitungen

$$f_x = 4x^3 - 4y \qquad f_y = 4y^3 - 4x$$

berechnet. Nachdem diese wiederum Funktionen von x und y sind, kann man weiter (partiell) ableiten, und findet

$$f_{xx} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 12x^2$$

$$f_{yy} = \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = 12y^2$$

die zweiten partiellen Ableitung nach x bzw. y. Man kann aber natürlich auch f_x nach y ableiten, d.h.

$$\frac{\partial}{\partial y} f_x = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right) = \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} = f_{xy} = -4.$$

Man spricht von der gemischten partiellen Ableitung, wobei zuerst nach x, dann nach y abgeleitet wurde. Es ist natürlich genauso möglich, f_y nach x abzuleiten,

$$\frac{\partial}{\partial x} f_y = \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} = f_{yx} = -4.$$

Diese gemischten partiellen Ableitungen sind etwas fundamental Neues, was es im eindimensionalen Fall nicht gab und geben konnte. Für die partiellen Ableitungen gilt jetzt folgender wichtiger Zusammenhang (in der deutschen Literatur als Satz von Schwarz, in der englischen Literatur als Clairaut's Theorem bezeichnet): *Besitzt $f(x,y)$ im Innern eines gewissen Bereichs, $a < x < b$, $c < y < d$, stetige Ableitungen f_{xy} und f_{yx}, so sind diese Ableitungen in allen inneren Punkten des Bereichs gleich, d.h. es gilt*

$$f_{xy} = f_{yx}, \qquad a < x < b, \quad c < y < d \tag{12}$$

Mit anderen Worten, das Resultat der Differentiation hängt (unter den oben genannten Voraussetzungen) nicht von der Reihenfolge ab, in der die (partiellen) Differentiationen durchgeführt werden. Diese Ergebnis gilt auch für höhere Ableitungen als auch für Funktionen mit mehr als zwei Veränderlichen, so gilt z.B. für die Funktion $f(x,y,z,t)$

$$f_{xxyzt} = f_{ytzxx} = f_{tzyxx} = \ldots \text{usw.}$$

Beispiel: Für $f(x,y) = \frac{e^{2x-y}}{y}$ findet man (die Details bleiben Ihnen überlassen!)

$$f_x = \frac{2e^{2x-y}}{y} \qquad f_y = -\frac{e^{2x-y}(y+1)}{y^2}.$$

Eine kurze Rechnung zeigt jetzt, daß

$$f_{xy} = \frac{y\,2e^{2x-y}(-1) - 1 \cdot 2e^{2x-y}}{y^2} = f_{yx} = -\frac{y+1}{y^2} 2e^{2x-y}$$

7.3 Stationäre Punkte für Funktionen zweier Veränderlicher

Eine Hauptanwendung der Differentialrechnung in einer Veränderlichen war die Bestimmung von Minima, Maxima und Wendepunkte von Funktionen, d.h., von Punkten einer Funktion an denen sich das Verhalten der Funktion ändert. Wir wollen derartige Untersuchungen jetzt auch für Funktionen zweier Veränderlicher durchführen, und kurz auch auf Funktionen mit mehr als zwei Veränderlichen eingehen. Maxima, Minima, und die sogenannten Sattelpunkte (die "Wendepunkte" im mehrdimensionalen Fall) bezeichnet man auch als *stationärer Punkte*.

Eine Funktion $f(x, y)$ habe im Punkt (a, b) ein Maximum (Minimum). Dann gilt in einer gewissen Umgebung um (a, b), daß

$$\Delta f = f(a + \Delta x,\, b + \Delta y) - f(a, b) \qquad \begin{cases} \leq 0 \text{ (Maximum)} \\ \geq 0 \text{ (Minimum)} \end{cases}$$

(Dies folgt ganz allgemein aus den Eigenschaften eines Maximums oder Minimus ohne jegliche Differentialrechnung). Gewinnt man jetzt wie im Abschnitt 7.1 aus $f(x, y)$ wieder zwei eindimensionale Hilfsfunktionen $f_1(x, b)$ und $f_2(a, y)$, (wobei jetzt a und b die x- bzw. $y-$ Werte des Punkts (a, b) sind, in denen $f(x, y)$ ein Maximum (Minimum) annimmt), so muß ganz sicher gelten, daß

$$\begin{array}{lll} f_1(x,b) & \text{hat für } x = a \text{ ein Maximum (Minimum), d.h.} & \left.\frac{df_1(x,b)}{dx}\right|_{x=a} = 0 \\ f_2(a,y) & \text{hat für } y = b \text{ ein Maximum (Minimum), d.h.} & \left.\frac{df_2(a,y)}{dy}\right|_{y=b} = 0 \end{array}$$

Übersetzt man dies wieder in die Sprache der partiellen Ableitungen, so findet man als *notwendiges* Kriterium für die Existenz eines Maximums oder Minimums, daß die partiellen Ableitungen simultan verschwinden müssen, d.h.

$$\begin{aligned} f_x(x,y) &= 0 \\ f_y(x,y) &= 0 \end{aligned} \tag{13}$$

Dieses Ergebnis läßt sich sofort auf Funktionen mehrerer Veränderlicher verallgemeinern. Die notwendige Bedingungen für das Vorhandensein stationärer Punkte einer Funktion $f(x, y, z, \ldots)$ ist das simultane Verschwinden aller ihrer ersten partiellen Ableitungen

$$\begin{aligned} f_x(x,y,z,\ldots) &= 0 \\ f_y(x,y,z,\ldots) &= 0 \\ f_z(x,y,z,\ldots) &= 0 \\ &\text{usw.} \end{aligned}$$

Kriterium Gl. 13 ist ein notwendiges, aber kein hinreichendes Kriterium für ein Maximum oder ein Minimum einer Funktion $f(x, y)$. Wir müssen zunächst ausschließen, daß es sich nicht um einen "Wendepunkt" (den man im mehrdimensionalen Fall *Sattelpunkt* nennt) handelt, und weiters müssen wir noch zwischen Maxima und Minima unterscheiden. Wir überlegen uns zunächst in Analogie zum eindimensionalen Fall ein paar Spezialfälle, danach geben wir (ohne Beweis) die allgemeine Regel an. (i) Bei Funktionen einer Veränderlichen ist Vorsicht geboten, wenn an einem Punkt x_0 sowohl erste als auch zweite Ableitung verschwinden, d.h. wenn $f'(x_0) = f''(x_0) = 0$ gilt. Auch für Funktionen zweier Veränderlicher gilt: Verschwindet zumindestens eine der reinen zweiten partiellen Ableitungen f_{xx} bzw. f_{yy} an einem Punkt (x_0, y_0), so handelt es sich bei diesem Punkt für gewöhnlich nicht um eine Extremstelle und spezielle Tests sind nötig. (ii) Im Eindimensionalen gibt das Vorzeichen der zweiten Ableitung an einer Kanditatenstelle Auskunft darüber, ob es sich bei dieser Stelle um ein Maximum oder Minimum handelt. Analoges gilt für Funktionen zweier Veränderlicher. Je nach Vorzeichen von f_{xx} bzw. f_{yy} im Kandidatenpunkt (x_0, y_0) handelt es sich um ein Maximum ($f_{xx} < 0$ und $f_{yy} < 0$) oder ein Minimum ($f_{xx} > 0$ und $f_{yy} > 0$). Insbesondere aber *muß das Vorzeichen der zweiten Ableitungen übereinstimmen*, sonst ist (x_0, y_0) mit Sicherheit keine Extremstelle, sondern ein Sattelpunkt.

Nach diesen Vorbemerkungen kommen wir jetzt zur allgemeinen Regel. Man betrachtet (für jede Kanditatenstelle $(x_{0,i}, y_{0,i})$) eine Größe Δ (oder D), die sogenannte Diskriminante:

$$\Delta(x, y) = f_{xx}\, f_{yy} - (f_{xy})^2 \tag{14}$$

Ist an einer Kanditatenstelle $(x_{0,i}, y_{0,i})$ die Diskriminante $\Delta(x_{0,i}, y_{0,i}) > 0$, so handelt es sich um eine Extremstelle und das Vorzeichen der zweiten Ableitung bestimmt (vgl. (ii) im vorigen Absatz), ob es sich um ein Maximum ($f_{xx}(x_{0,i}, y_{0,i}) < 0$) oder ein Minimum ($f_{xx}(x_{0,i}, y_{0,i}) > 0$) handelt. Gilt hingegen $\Delta(x_{0,i}, y_{0,i}) < 0$, so handelt es sich um einen Sattelpunkt. Tritt schließlich der Fall $\Delta = 0$ ein, so muß die Entscheidung zwischen Maximum, Minimum oder Sattelpunkt mit anderen, hier nicht behandelbaren Methoden getroffen werden. Wenn Sie sich die Vorzeichenregeln für Δ durch den Kopf gehen lassen, so sehen Sie, daß die allgemeine Regel unsere Spezialfälle (i) und (ii) miteinschließt.

Eine Verallgemeinerung der eben aufgestellten Regel zur Unterscheidung zwischen Minima, Maxima und Sattelpunkten für Funktionen von mehr als zwei Variabeln ist äußerst mühsam. In der Praxis bestimmt man meist die Kanditatenstelle(n) und vergewissert sich durch Stichproben, ob es sich um ein Maximum oder ein Minimum handelt.

Beispiel: Gesucht sind die stationären Punkte der Funktion Gl. 10, $f(x, y) = x^4 + y^4 - 4xy + 1$. Wir kennen bereits alle benötigten Ableitungen: $f_x = 4x^3 - 4y$, $f_y = 4y^3 - 4x$, $f_{xx} = 12x^2$, $f_{yy} = 12y^2$, $f_{xy} = f_{yx} = -4$. Gemäß Kriterium Gl. 13 benötigen wir zunächst die Lösung des Gleichungssystems:

$$\begin{aligned} f_x = 4x^3 - 4y &= 0 \qquad \text{(I)} \\ f_y = 4y^3 - 4x &= 0 \qquad \text{(II)} \end{aligned}$$

Es folgt z.B. aus (I) $y = x^3$. Einsetzen in (II) führt auf

$$x^9 - x = x(x^8 - 1) = 0 \qquad (*)$$

Gl. (*) hat die Lösungen $x_1 = 0$, $x_2 = +1$ und $x_3 = -1$. Daraus ergeben sich mit $y = x^3$ die dazugehörigen y-Werte $y_1 = 0$, $y_2 = +1$ und $y_3 = -1$. Die Kanditatenstellen (Lösungen des Gleichungssystems (I), (II)) sind also $(0, 0)$, $(1, 1)$ und $(-1, -1)$.

Für diese Kanditatenstellen ist jetzt das Verhalten von Δ (Gl. 14) zu untersuchen. In der Praxis stellt man am besten eine Tabelle auf:

	(0,0)	(1,1)	(-1,-1)
f_{xx}	0	12	12
f_{yy}	0	12	12
f_{xy}	-4	-4	-4
Δ	$-16 < 0$	$144-16 > 0$	$128 > 0$
	Sattelpkt.	Min.	Min.

Wegen der negativen Diskriminante handelt es sich bei $(0, 0)$ um einen Sattelpunkt. Die beiden anderen Kanditatenstellen sind Extrema ($\Delta > 0$), und zwar Minima, da in beiden Fällen $f_{xx} > 0$ (genauso gut könnte man auch f_{yy} zur Entscheidung heranziehen, denn diese beiden Ableitungen müssen gleiches Vorzeichen haben).

Verwendete Literatur

- E. Steiner “The Chemistry Maths Book”, Oxford Science, Oxford, New York 1996.
- H. G. Zachmann “Mathematik für Chemiker”, 4. Auflage, Verlag Chemie, Weinheim, Deerfield Beach, Basel 1981.
- W. I. Smirnow “Lehrbuch der höheren Mathematik”, Teil I, 16. Auflage, Verlag Harri Deusch, Frankfurt, 1971.

Auflistung von Änderungen — “revision history”

Dezember 2003/Jänner 2004 Erste Rohfassung.

GNU Free Documentation License

"Endorsements", or "History".) To "Preserve the Title" of such a section when you modify the Document means that it remains a section "Entitled XYZ" according to this definition.

The Document may include Warranty Disclaimers next to the notice which states that this License applies to the Document. These Warranty Disclaimers are considered to be included by reference in this License, but only as regards disclaiming warranties: any other implication that these Warranty Disclaimers may have is void and has no effect on the meaning of this License.

2. VERBATIM COPYING

You may copy and distribute the Document in any medium, either commercially or noncommercially, provided that this License, the copyright notices, and the license notice saying this License applies to the Document are reproduced in all copies, and that you add no other conditions whatsoever to those of this License. You may not use technical measures to obstruct or control the reading or further copying of the copies you make or distribute. However, you may accept compensation in exchange for copies. If you distribute a large enough number of copies you must also follow the conditions in section 3.

You may also lend copies, under the same conditions stated above, and you may publicly display copies.

3. COPYING IN QUANTITY

If you publish printed copies (or copies in media that commonly have printed covers) of the Document, numbering more than 100, and the Document's license notice requires Cover Texts, you must enclose the copies in covers that carry, clearly and legibly, all these Cover Texts: Front-Cover Texts on the front cover, and Back-Cover Texts on the back cover. Both covers must also clearly and legibly identify you as the publisher of these copies. The front cover must present the full title with all words of the title equally prominent and visible. You may add other material on the covers in addition. Copying with changes limited to the covers, as long as they preserve the title of the Document and satisfy these conditions, can be treated as verbatim copying in other respects.

If the required texts for either cover are too voluminous to fit legibly, you should put the first ones listed (as many as fit reasonably) on the actual cover, and continue the rest onto adjacent pages.

If you publish or distribute Opaque copies of the Document numbering more than 100, you must either include a machine-readable Transparent copy along with each Opaque copy, or state in or with each Opaque copy a computer-network location from which the general network-using public has access to download using public-standard network protocols a complete Transparent copy of the Document, free of added material. If you use the latter option, you must take reasonably prudent steps, when you begin distribution of Opaque copies in quantity, to ensure that this Transparent copy will remain thus accessible at the stated location until at least one year after the last time you distribute an Opaque copy (directly or through your agents or retailers) of that edition to the public.

It is requested, but not required, that you contact the authors of the Document well before redistributing any large number of copies, to give them a chance to provide you with an updated version of the Document.

4. MODIFICATIONS

You may copy and distribute a Modified Version of the Document under the conditions of sections 2 and 3 above, provided that you release the Modified Version under precisely this License, with the Modified Version filling the role of the Document, thus licensing distribution and modification of the Modified Version to whoever possesses a copy of it. In addition, you must do these things in the Modified Version:

A. Use in the Title Page (and on the covers, if any) a title distinct from that of the Document, and from those of previous versions (which should, if there were any, be listed in the History section of the Document). You may use the same title as a previous version if the original publisher of that version gives permission.

B. List on the Title Page, as authors, one or more persons or entities responsible for authorship of the modifications in the Modified Version, together with at least five of the principal authors of the Document (all of its principal authors, if it has fewer than five), unless they release you from this requirement.

C. State on the Title page the name of the publisher of the Modified Version, as the publisher.

D. Preserve all the copyright notices of the Document.

E. Add an appropriate copyright notice for your modifications adjacent to the other copyright notices.

F. Include, immediately after the copyright notices, a license notice giving the public permission to use the Modified Version under the terms of this License, in the form shown in the Addendum below.

G. Preserve in that license notice the full lists of Invariant Sections and required Cover Texts given in the Document's license notice.

H. Include an unaltered copy of this License.

I. Preserve the section Entitled "History", Preserve its Title, and add to it an item stating at least the title, year, new authors, and publisher of the Modified Version as given on the Title Page. If there is no section Entitled "History" in the Document, create one stating the title, year, authors, and publisher of the Document as given on its Title Page, then add an item describing the Modified Version as stated in the previous sentence.

J. Preserve the network location, if any, given in the Document for public access to a Transparent copy of the Document, and likewise the network locations given in the Document for previous versions it was based on. These may be placed in the "History" section. You may omit a network location for a work that was published at least four years before the Document itself, or if the original publisher of the version it refers to gives permission.

K. For any section Entitled "Acknowledgements" or "Dedications", Preserve the Title of the section, and preserve in the section all the substance and tone of each of the contributor acknowledgements and/or dedications given therein.

L. Preserve all the Invariant Sections of the Document, unaltered in their text and in their titles. Section numbers or the equivalent are not considered part of the section titles.

M. Delete any section Entitled "Endorsements". Such a section may not be included in the Modified Version.

N. Do not retitle any existing section to be Entitled "Endorsements" or to conflict in title with any Invariant Section.

O. Preserve any Warranty Disclaimers.

If the Modified Version includes new front-matter sections or appendices that qualify as Secondary Sections and contain no material copied from the Document, you may at your option designate some or all of these sections as invariant. To do this, add their titles to the list of Invariant Sections in the Modified Version's license notice. These titles must be distinct from any other section titles.

You may add a section Entitled "Endorsements", provided it contains nothing but endorsements of your Modified Version by various parties–for example, statements of peer review or that the text has been approved by an organization as the authoritative definition of a standard.

You may add a passage of up to five words as a Front-Cover Text, and a passage of up to 25 words as a Back-Cover Text, to the end of the list of Cover Texts in the Modified Version. Only one passage of Front-Cover Text and one of Back-Cover Text may be added by (or through arrangements made by) any one entity. If the Document already includes a cover text for the same cover, previously added by you or by arrangement made by the same entity you are acting on behalf of, you may not add another; but you may replace the old one, on explicit permission from the previous publisher that added the old one.

The author(s) and publisher(s) of the Document do not by this License give permission to use their names for publicity for or to assert or imply endorsement of any Modified Version.

5. COMBINING DOCUMENTS

You may combine the Document with other documents released under this License, under the terms defined in section 4 above for modified versions, provided that you include in the combination all of the Invariant Sections of all of the original documents, unmodified, and list them all as Invariant Sections of your combined work in its license notice, and that you preserve all their Warranty Disclaimers.

The combined work need only contain one copy of this License, and multiple identical Invariant Sections may be replaced with a single copy. If there are multiple Invariant Sections with the same name but different contents, make the title of each such section unique by adding at the end of it, in parentheses, the name of the original author or publisher of that section if known, or else a unique number. Make the same adjustment to the section titles in the list of Invariant Sections in the license notice of the combined work.

In the combination, you must combine any sections Entitled “History” in the various original documents, forming one section Entitled “History”; likewise combine any sections Entitled “Acknowledgements”, and any sections Entitled “Dedications”. You must delete all sections Entitled “Endorsements”.

6. COLLECTIONS OF DOCUMENTS

You may make a collection consisting of the Document and other documents released under this License, and replace the individual copies of this License in the various documents with a single copy that is included in the collection, provided that you follow the rules of this License for verbatim copying of each of the documents in all other respects.

You may extract a single document from such a collection, and distribute it individually under this License, provided you insert a copy of this License into the extracted document, and follow this License in all other respects regarding verbatim copying of that document.

7. AGGREGATION WITH INDEPENDENT WORKS

A compilation of the Document or its derivatives with other separate and independent documents or works, in or on a volume of a storage or distribution medium, is called an “aggregate” if the copyright resulting from the compilation is not used to limit the legal rights of the compilation’s users beyond what the individual works permit. When the Document is included an aggregate, this License does not apply to the other works in the aggregate which are not themselves derivative works of the Document.

If the Cover Text requirement of section 3 is applicable to these copies of the Document, then if the Document is less than one half of the entire aggregate, the Document’s Cover Texts may be placed on covers that bracket the Document within the aggregate, or the electronic equivalent of covers if the Document is in electronic form. Otherwise they must appear on printed covers that bracket the whole aggregate.

8. TRANSLATION

Translation is considered a kind of modification, so you may distribute translations of the Document under the terms of section 4. Replacing Invariant Sections with translations requires special permission from their copyright holders, but you may include translations of some or all Invariant Sections in addition to the original versions of these Invariant Sections. You may include a translation of this License, and all the license notices in the Document, and any Warrany Disclaimers, provided that you also include the original English version of this License and the original versions of those notices and disclaimers. In case of a disagreement between the translation and the original version of this License or a notice or disclaimer, the original version will prevail.

If a section in the Document is Entitled “Acknowledgements”, “Dedications”, or “History”, the requirement (section 4) to Preserve its Title (section 1) will typically require changing the actual title.

9. TERMINATION

You may not copy, modify, sublicense, or distribute the Document except as expressly provided for under this License. Any other attempt to copy, modify, sublicense or distribute the Document is void, and will automatically terminate your rights under this License. However, parties who have received copies, or rights, from you under this License will not have their licenses terminated so long as such parties remain in full compliance.

10. FUTURE REVISIONS OF THIS LICENSE

The Free Software Foundation may publish new, revised versions of the GNU Free Documentation License from time to time. Such new versions will be similar in spirit to the present version, but may differ in detail to address new problems or concerns. See http://www.gnu.org/copyleft/.

Each version of the License is given a distinguishing version number. If the Document specifies that a particular numbered version of this License “or any later version” applies to it, you have the option of following the terms and conditions either of that specified version or of any later version that has been published (not as a draft) by the Free Software Foundation. If the Document does not specify a version number of this License, you may choose any version ever published (not as a draft) by the Free Software Foundation.

ADDENDUM: How to use this License for your documents

To use this License in a document you have written, include a copy of the License in the document and put the following copyright and license notices just after the title page:

Copyright (c) YEAR YOUR NAME. Permission is granted to copy, distribute and/or modify this document under the terms of the GNU Free Documentation License, Version 1.2 or any later version published by the Free Software Foundation; with no Invariant Sections, no Front-Cover Texts, and no Back-Cover Texts. A copy of the license is included in the section entitled “GNU Free Documentation License”.

If you have Invariant Sections, Front-Cover Texts and Back-Cover Texts, replace the “with...Texts.” line with this:

with the Invariant Sections being LIST THEIR TITLES, with the Front-Cover Texts being LIST, and with the Back-Cover Texts being LIST.

If you have Invariant Sections without Cover Texts, or some other combination of the three, merge those two alternatives to suit the situation.

If your document contains nontrivial examples of program code, we recommend releasing these examples in parallel under your choice of free software license, such as the GNU General Public License, to permit their use in free software.