13. Differentialgleichungen und Stammfunktionen

13.1 Bemerkung: Viele Phänomene werden durch Differentialgleichungen beschrieben, d.h. Gleichungen die nicht nur die gesuchte Funktion f, sondern auch deren Ableitung(en) enthalten. Das Lösen solcher Gleichungen gehört zum Handwerkszeug des Chemikers.

13.2 Beispiele: Bei chemischen Prozessen ist die Änderungsrate oft proportional zu den involvierten Stoffen - typisch sind Reaktionen erster Ordnung oder zweiter Ordnung

1) Reaktion erster Ordnung

$$A \to B$$

typisches Beispiel: radioaktiver Zerfall

$$^{238}_{92}U \to {}^{234}_{90}Th$$

Jedes vorhandene Uranatom zerfällt mit gewisser Wkeit, unabhängig davon, was die anderen Atome machen; die Änderung der Anzahl von Uranatomen ist also proportional zu der Anzahl selbst: Sei

$f(t) :=$ Anzahl von U-Atomen zur Zeit t,

dann haben wir also

$$f'(t) = -\alpha f(t)$$

Proportionalitätskonstante

negativ, da die Anzahl durch Zerfall abnimmt

Die Lösung von $f' = f$ kennen wir schon, nämlich

$$f(t) = e^t$$

und für die Variation $f' = -\alpha f$ sieht man leicht, dass

$f(t) = e^{-\alpha t}$ eine Lösung ist, da

$$f'(t) = e^{-\alpha \cdot t}(-\alpha)$$

Allerdings gibt es mehrere Lösungen, wir können nämlich mit einer Konstanten c multiplizieren:

$f(t) = c \cdot e^{-\alpha t}$, dann ist auch

$f'(t) = c \cdot e^{-\alpha t} \cdot (-\alpha) = -\alpha f(t)$

Für diese Lösung gilt dann:

$f(0) = c \cdot e^{-\alpha \cdot 0} = c$,

d.h. c ist die Anfangsmenge zum Zeitpunkt $t = 0$, die dann exponentiell zerfällt.

Frage: Sind dies nun alle Lösungen?

[Wenn es noch viele andere Lösungen ohne sinnvolle physikalische / chemische Parameter gäbe, dann wäre die Angabe der Differentialgleichung nicht wirklich beschreibend für die Situation.]

Sei f eine Lösung von $f' = -\alpha f$, wir wollen dann sehen, ob f sich arg von $e^{-\alpha t}$ unterscheiden kann, deshalb betrachte

$$g(t) := \frac{f(t)}{e^{-\alpha t}} = f(t) \cdot e^{\alpha t}$$

Dann gilt:

$$g'(t) = \underbrace{f'(t) \cdot e^{\alpha t}}_{-\alpha f(t) e^{\alpha t}} + f(t) e^{\alpha t} \cdot \alpha$$

$$= f(t) e^{\alpha (t)} [-\alpha + \alpha]$$

$$= 0$$

also $g'(t) = 0$

Davon kennen wir als Lösung

$g(t) = c$ konstant

Dies entspricht dann $f(t) = g(t) e^{-\alpha t}$

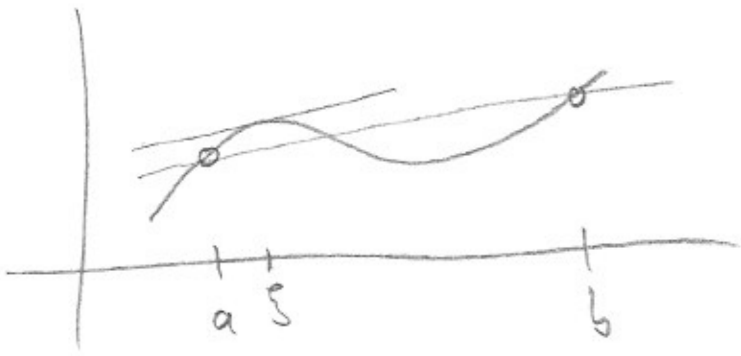
$$= c\, e^{-\alpha t}$$

Gibt es andere Lösung von $g'(t) = 0$?

Nein!

Denn sei $g(t)$ eine Funktion mit $g'(t) = 0$ für alle t

Falls g nicht konstant ist, so haben wir $a \neq b$ mit $g(a) \neq g(b)$



Dann gibt es nach Mittelwertsatz einen Pkt ξ, so dass

$$0 = g'(\xi) = \frac{g(b) - g(a)}{b - a} \neq 0$$

das kann also nicht sein!

Fazit: Falls ich ein Geschehen durch die Differentialgleichung

$$f'(t) = -\alpha f(t)$$

beschreiben kann, dann weiß ich, dass das zeitliche Verhalten durch

$$f(t) = f(0) \cdot e^{-\alpha t}$$

gegeben ist.

2) Reaktion zweiter Ordnung

$A + B \rightarrow C$

A und B müssen reagieren, die Wkeit dafür ist proportional zum Produkt der Konzentration von A und der Konzentration von B

typisches Beispiel: Zerfall von Stickstoffdioxid

$NO_2 + NO_2 \rightarrow NO + NO + O_2$

Setze $f(t) :=$ Konzentration von NO_2 zur Zeit t

dann wird der Zerfall beschrieben durch:

$f'(t) = -\alpha\, f(t) \cdot f(t) = -\alpha\, f(t)^2$

In Aufgabe 4, Blatt 10 haben wir gesehen, dass eine Lösung hiervon gegeben ist durch

$f(t) = \dfrac{1}{\alpha \cdot t + c}$ mit einer Konstante c

Für $t=0$ liefert dies

$$f(0) = \frac{1}{c}, \quad \text{d. h.} \quad c = \frac{1}{f(0)}$$

also

$$f(t) = \frac{1}{\alpha \cdot t + \frac{1}{f(0)}} \qquad (*)$$

Dieser Zerfall hat ganz anderes Verhalten wie exponentieller Zerfall, insbesondere ist er viel langsamer für $t \to \infty$.

[Man kann wiederum zeigen, dass $(*)$ die einzige Lösung von $f' = -\alpha f^2$ ist.]

13.3 Bemerkung:

1) Man sieht, dass die Lösung unserer Differentialgleichungen nicht eindeutig ist, sondern noch von weiterer Information (hier: Anfangskonzentration) abhängt – was aber aus der chemischen Warte auch sinnvoll ist.

2) Die einfachste Differentialgleichung ist von der Gestalt

$f' = g$ für eine bekannte Fkt g
(f ist hier nicht involviert)

Das Lösen hiervon bedeutet also: wir kennen die Ableitung einer Funktion, was ist dann die Fkt.

Beispiel: Wir kennen den Verlauf der Geschwindigkeit, was ist dann der Verlauf des Weges.

Anstatt zu differenzieren

$$f \rightsquigarrow f'$$

wollen wir nun das umgekehrte Problem lösen

$$f' \rightsquigarrow f$$

Diese Umkehrung des Differenzierens nennt man Integrieren oder das Suchen nach einer Stammfunktion.

<u>13.4 Definition:</u> Sei $f:[a,b]\to\mathbb{R}$ eine Funktion. Eine Funktion $F:[a,b]\to\mathbb{R}$ heißt <u>Stammfunktion</u> von f, wenn gilt

$$F'(x)=f(x) \quad \text{für alle } x\in(a,b)$$

Wir schreiben auch

$$F(x)=\int f(x)\,dx$$

und nennen F das (unbestimmte) <u>Integral</u> von f

<u>13.5 Bemerkung:</u> 1) Beachte, dass eine Stammfunktion nicht eindeutig ist, da mit F auch $F+c$ (für Konstante c) eine Stammfunktion von f ist:

$$(F+c)'=F'=f$$

Es gilt aber auch die Umkehrung: Sind F und G Stammfunktionen von f, so gilt

$$(F-G)'=F'-G'=f-f=0$$

und $F-G$ ist somit nach 13.2.(1)
konstant, d.h. $G=F+c$.

Mit $\int f(x)dx$ meinen wir dann diese Familie $F+c$, oft wählen wir aber ein spezielles angemessenes c.

Statt $\int x\,dx = \{\frac{1}{2}x^2 + c\}$

schreiben wir einfach

$$\int x\,dx = \frac{1}{2}x^2$$

2) Die Existenz von Stammfunktionen im allgemeinen ist im Augenblick nicht klar, wir werden darauf aber später zurückkommen.

3) Zunächst wollen wir uns fragen, wie gut wir integrieren können.

Differenzieren können wir recht gut, denn

(i) wir kennen konkret die Ableitungen von etlichen Funktionen

(ii) wir haben Regeln für die Ableitungen von komplizierteren zusammengesetzten Fkten

- $(f+g)' = f' + g'$
- $(f \cdot g)' = f' g + f \cdot g'$
- $(f \circ g)'(x) = f'(g(x)) \cdot g'(x)$

Fürs Integrieren sollten wir das einfach alles umdrehen:

(i) macht dabei keine Probleme, statt $\sin' = \cos$ lesen wir

$$\int \cos x \, dx = \sin x$$

(ii) ist zwar okay für die Addition, d.h.

$$\int (f+g)(x) \, dx = \int f(x) \, dx + \int g(x) \, dx,$$

aber die anderen (Produkt und Komposition) drehen sich leider nicht so schön um. Die Produkt-regel sagt fürs Integrieren

$$f \cdot g = \int f' \cdot g \, dx + \int f \cdot g' \, dx$$

dadurch kann man ein Integral auf ein anderes zurückführen, es sagt aber nicht, dass die Kenntnis von $\int f(x)\,dx$ und von $\int g(x)\,dx$ mir erlaubt, auch $\int f(x)\cdot g(x)\,dx$ zu berechnen.

13.6. Beispiele für bekannte Stammfunktionen:

(a) $\int x^n\,dx = \frac{1}{n+1}\,x^{n+1}$ für $n \neq -1$, $n \in \mathbb{Z}$

(b) gilt sogar für alle $-1 \neq \alpha \in \mathbb{R}$:

$$\int x^\alpha\,dx = \frac{1}{\alpha+1}\,x^{\alpha+1} \qquad (x > 0)$$

(c) der fehlende Fall ist

$$\int \frac{1}{x}\,dx = \ln x$$

(d) $\int e^x\,dx = e^x$

(e) $\int \sin x\,dx = -\cos x$

$$\int \cos x\,dx = \sin x$$

(f) $\left.\begin{array}{l} \int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \arcsin x \\ -\int \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \arccos x \end{array}\right\}$ beachte: $\arcsin x = \frac{\pi}{2} - \arccos x$

13.7 Satz: Falls alle Ausdrücke Sinn machen, so gilt:

1) $\int c\, f(x)\, dx = c \int f(x)\, dx$ für $c \in \mathbb{R}$

2) $\int (f(x)+g(x))\, dx = \int f(x)\, dx + \int g(x)\, dx$

3) $\int f(x)\, g'(x)\, dx = f(x)\, g(x) - \int f'(x)\, g(x)\, dx$

4) $\int (f' \circ g)(x) \cdot g'(x)\, dx = (f \circ g)(x)$

(3) heißt partielle Integration
(4) heißt Substitutionsregel

13.8 Bemerkungen: (1) und (2) sind direkte Folgerungen aus den Ableitungsregeln

$(c \cdot f)' = c \cdot f'$ und $(f+g)' = f' + g'$

(3) folgt aus der Produktregel

$$(f \cdot g)' = f' \cdot g + f \cdot g'$$

$$\Rightarrow \underbrace{\int (f \cdot g)'(x)}_{f \cdot g\,(x)} = \int f'(x)\, g(x)\, dx + \int f(x)\, g'(x)\, dx$$

Dies erlaubt dann die Berechnung von $\int f'(x)g(x)\,dx$ auf $\int f(x)g'(x)\,dx$ zurückzuführen. Manchmal ist dies hilfreich, manchmal nicht. Die Zerlegung von $h = f' \cdot g$ zur Berechnung von $\int h(x)\,dx$ ist nicht unbedingt klar ersichtlich.

(4) Die Integration von zusammengesetzten Funktionen ist also nur in sehr speziellen Fällen möglich. Obige Form folgt direkt aus der Kettenregel

$$(f \circ g)'(x) = \underbrace{f'(g(x))}_{(f' \circ g)(x)} \cdot g'(x)$$

Machen wir die Ersetzung

$$f \rightsquigarrow F \qquad\qquad g \rightsquigarrow G$$
$$f' \rightsquigarrow F' = f \qquad\qquad g' \rightsquigarrow G' = g$$

dann liest es sich so:

$$\int (f \circ g)(x) \cdot g'(x)\, dx = (F \circ g)(x)$$

Wenn wir also $f \circ g$ integrieren wollen, dann müssen wir nicht nur die Stammfunktion F von f kennen, sondern wir brauchen auch zusätzlich den Faktor g' im Integral – was eine ziemlich einschränkende Forderung ist und wiederum auf einer guten Intuition / Erfahrung zur Zerlegung einer gegebenen zu integrierenden Fkt h in der Form $h = f \circ g \cdot g'$ beruht.

13.5. Beispiele: 1) Beispiele für partielle Integration

i) $\int \ln x \, dx \overset{?}{=}$ $\quad f(x) = \ln x$, $g(x) = x$

$$= \int \underbrace{\ln x}_{f} \cdot \underbrace{x'}_{g'} \, dx = \ln x \cdot x - \underbrace{\int \frac{1}{x} \cdot x \, dx}_{\substack{= \int 1 \, dx \\ = x}}$$

also: $\int \ln x \, dx = x \cdot \ln x - x$

ii) $\int \cos^2 x \, dx \overset{?}{=}$

$f(x) = \cos x$

$g(x) = \sin x$

$= \int \cos x \cdot \sin' x \, dx$

$= \cos x \cdot \sin x - \int (-\sin x) \cdot \sin x \, dx$

$= \cos x \cdot \sin x + \underbrace{\int \underbrace{\sin^2 x}_{1-\cos^2 x} \, dx}_{\underbrace{\int 1 \, dx}_{x} - \int \cos^2 x \, dx}$

$\Rightarrow 2 \int \cos^2 x \, dx = \cos x \cdot \sin x + x$

$\Rightarrow \int \cos^2 dx = \frac{1}{2} (x + \cos x \cdot \sin x)$

2) Beispiele für Substitution

i) Da $(f^n(x))' = n \, f^{n-1}(x) \cdot f'(x)$

erhalten wir

$$\int f^n(x) \, f'(x) \, dx = \frac{1}{n+1} f^{n+1}(x)$$

Ohne den Faktor f' können wir

$\int f^n(x)\,dx$ im Allgemeinen nicht direkt

integrieren

z.B. $\int \cos^2 x \cdot \sin x \, dx = -\frac{1}{3}\cos^3 x$

ii) Da $\ln(f)' = \frac{1}{f}\cdot f'$ gilt

$$\int \frac{f'(x)}{f(x)}\,dx = \ln(f(x))$$

z.B. $\int \frac{1}{x\cdot \ln x}\,dx = \ln(\ln x)$

iii) e^x können wir einfach integrieren

$\int e^x\,dx = e^x$,

aber was ist z.B. mit e^{x^2}?

Haben wir den Faktor $(x^2)' = 2x$, so

ist das einfach

$$\int x\cdot e^{x^2}\,dx = \frac{1}{2}e^{x^2}$$

Ohne den Faktor gibt es allerdings

keine Formel mit den uns bekannten

Fkten für $\int e^{x^2}\,dx$

13.6. Integration von rationalen Fktn durch Partialbruchzerlegung

Da $\int x^n \, dx = \frac{1}{n+1} x^{n+1}$ können wir alle Polynome einfach integrieren:

$$\int [a_0 + a_1 x + \dots + a_n x^n] \, dx =$$

$$a_0 x + \frac{1}{2} a_1 x^2 + \dots + \frac{1}{n+1} a_n x^n$$

Wie sieht es mit rationalen Funktionen

$$f(x) = \frac{p(x)}{q(x)}$$ aus

Nach 10.5. wissen wir, dass wir dies durch Polynomdivision auf den Fall reduzieren können, wo

Grad von p < Grad von q

z.B. $$f(x) = \frac{x^4 + 2x^3 + x^2 - 5}{x^2 + x + 1}$$

können wir schreiben als

$$f(x) = \underbrace{x^2 + x - 1}_{\text{Integral darüber ist einfach}} + \underbrace{\frac{-4}{x^2 - x + 1}}_{\text{Problem ist dieser Term!}}$$

(10.5)
Gemäß Partialbruchzerlegung können wir aber solche Terme als Linearkombination von einigen speziellen Termen schreiben:

$$\frac{a}{(x-\alpha)^k} \quad , \quad \frac{ax+b}{(x^2+\alpha x+\beta)^k}$$

Für all diese speziellen Terme kennt man die Integrale; insbesondere gilt

$$\int \frac{1}{x^2+1}\, dx = \arctan x$$

Beispiel: $f(x) = \dfrac{1}{x^3-x^2+x-1}$

Der Nenner hat in $\mathbb{R}$ nur die Nullstelle $x_1 = 1$ und man hat

$$x^3-x^2+x-1 = (x-1)(x^2+1)$$

Dies führt zu der Partialbruchzerlegung

$$f(x) = \frac{1}{2}\,\frac{1}{x-1} - \frac{1}{2}\,\frac{x+1}{x^2+1}$$

Dies können wir nun integrieren:

$$\int f(x)\,dx = \frac{1}{2}\underbrace{\int \frac{1}{x-1}\,dx}_{\ln(x-1)} - \frac{1}{2}\underbrace{\int \frac{x+1}{x^2+1}\,dx}$$

$$\rightarrow \underbrace{\int \frac{x}{x^2+1}\,dx}_{\frac{1}{2}\ln(x^2+1)} + \underbrace{\int \frac{1}{x^2+1}\,dx}_{\arctan x}$$

also

$$\int f(x)\,dx = \frac{1}{2}\ln(x-1) - \frac{1}{4}\ln(x^2+1) - \frac{1}{2}\arctan x$$

Beachte, dass wir uns hier auf $x > 1$ beschränken müssen, da ln nur auf $\mathbb{R}^+$ definiert

Allerdings können wir $\frac{1}{x}$ auch als Funktion auf $\mathbb{R}^- := \{x \in \mathbb{R} \mid x < 0\}$ integrieren, dort ist nämlich:

$$\ln'(-x) = \frac{1}{-x}\cdot(-1) = \frac{1}{x}$$

also allgemein: $\int \frac{1}{x}\,dx = \ln|x|$