Theoretische Chemie
Prof. Dr. Uwe Manthe

Blatt 10

Übungen zur Vorlesung
Mathematik II für Studierende der Chemie und Biochemie

1. Entwickeln Sie die Funktion $f(x, y, z) = \sin(x + y)\cos(y + z)$ in eine Taylorreihe um den Punkt $(x_0, y_0, z_0) = (0, 0, 0)$ bis zur dritten Ordnung.

2. Bestimmen Sie die Taylor–Entwicklung (beliebiger Ordnung) von
$$f(x, y) = \frac{\mathrm{e}^x}{1 - y} \qquad (|y| < 1)$$
im Nullpunkt.

3. Gegeben sei die Funktion $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}\ ,\ f(x, y) = e^{(-x^2+y^2)} - 2x^2 + y^2\ .$
   (a) Bestimmen Sie die Richtungsableitung in Richtung $\frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1)^T$ an den Punkten $(x, y) = (0, 0)$ und $(x, y) = (1, 0)$.
   (b) Bestimmen Sie Lage und Art der stationären Punkte von f.

4. Für die Punkte $a_1, a_2, \dots, a_N \in \mathbb{R}^n$ bestimmen Sie den Punkt $x \in \mathbb{R}^n$, für den $\sum_{j=1}^{N} \langle x - a_j | x - a_j \rangle$ den kleinsten Wert annimmt.

Zusatzaufgaben:

5. Gegeben sei $f(x, y) = 2x^2 - 3xy^2 + y^4$. Bestimmen Sie Lage und Art der stationären Punkte von f.

6. Gegeben sei die Funktion $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}, \quad f(x, y) = xy \exp\left(\frac{x^2}{4} + \frac{y^2}{4}\right)$.
   (a) Bestimmen Sie den Gradienten von f, d.h. ∇f.
   (b) Berechnen Sie die Hesse-Matrix $\mathbf{H}_f$ der Funktion f.
   (c) Bestimmen Sie Lage und Art der stationären Punkte der Funktion f.
   (d) Bestimmen Sie die Taylorentwicklung der Funktion f um den Punkt $(1, 0)$ bis zur zweiten Ordnung.
   (e) Bestimmen Sie die Richtungsableitung in Richtung $\frac{1}{\sqrt{5}}(2, -1)^T$ am Punkt $(x, y) = (0, 1)$.