

# Mathematik Zusammenfassung: Mehrdimensionale Integration

7. Januar 2020

## Bereichsintegrale

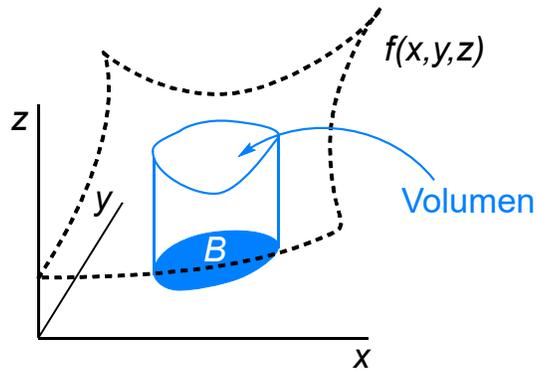
Ein Bereichsintegral ist die Verallgemeinerung der aus der Schule bzw. Grundvorlesung bekannten Integrale  $\int_{x_a}^{x_b} f(x,y) dx$ . Der Betrag eines solchen Integrals ist durch die (mit dem Vorzeichen gewichtete) Fläche zwischen dem Graphen und der  $x$ -Achse gegeben. Der Integrationsbereich ist in diesem Fall ein Intervall  $I = \{x \in \mathbb{R} \mid x_a \leq x \leq x_b\}$ . Nun wird dieser Integrationsbereich auf zwei und drei Dimensionen ausgeweitet. Wir beginnen mit einem zweidimensionalen Bereich.

**Definition (Doppelintegral):** Gegeben sei ein Bereich  $B = \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 \mid x_a \leq x \leq x_b \text{ und } y_a(x) \leq y \leq y_b(x)\}$ . Dann ist das Doppelintegral einer Funktion  $f(x,y)$  über  $B$  gegeben durch

$$\int_B f(x,y) d(x,y) = \int_{x_a}^{x_b} \left[ \int_{y_a}^{y_b} f(x,y) dy \right] dx.$$

Bei der Integration über  $y$  wird  $x$  als Konstante behandelt, genauso wie bei Integration über  $x$  die Variable  $y$  konstant gehalten wird. Für den Fall, dass  $y_a$  und  $y_b$  keine Funktionen von  $x$  sind, es sich also um Konstanten handelt, ist nach dem *Satz von FUBINI* die Integrationsreihenfolge egal.

Das Doppelintegral hat eine anschauliche geometrische Bedeutung. Betrachten wir die Funktion  $f(x,y)$ , welche die gesamte  $x,y$ -Ebene  $D = \mathbb{R}^2$  als Definitionsbereich haben soll. Nun kann  $f(x,y)$  als „fliegender Teppich“ in einem dreidimensionalen Koordinatensystem veranschaulicht werden. Der Bereich  $B$ , über den integriert werden soll, stellt eine Teilmenge des Definitionsbereiches dar, also gilt  $B \subset \mathbb{R}^2$ . Das Doppelintegral über  $B$  ist nichts anderes als das Volumen unter dem Graphen von  $f(x,y)$ , vgl. Abbildung 1.



**Abbildung 1:** Interpretation des Doppelintegrals.

Die Integration von Funktionen über einen dreidimensionalen Bereich erfolgt ganz analog.

**Definition (Dreifachintegral):** Gegeben sei ein Bereich  $B = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x_a \leq x \leq x_b, y_a(x) \leq y \leq y_b(x) \text{ und } z_a(x, y) \leq z \leq z_b(x, y)\}$ . Dann ist das Dreifachintegral einer Funktion  $f(x, y, z)$  über  $B$  gegeben durch

$$\int_B f(x, y, z) d(x, y, z) = \int_{x_a}^{x_b} \left[ \int_{y_a}^{y_b} \left\{ \int_{z_a}^{z_b} f(x, y, z) dz \right\} dy \right] dx.$$

Wie beim Doppelintegral können die Grenzen auch unabhängig voneinander sein, sodass die Integrationsreihenfolge frei wählbar ist.

Die Interpretation des Dreifachintegrals ist nun allerdings nicht mehr intuitiv als (dreidimensionales) Volumen unter einem Graphen zu verstehen, denn der Bereich  $B$  stellt nun bereits ein Volumenelement dar. Stattdessen können wir das Dreifachintegral als Dichte dieses Volumenelements auffassen.

**Beispiel (Interpretation Dreifachintegral):** Ein in der Chemie sehr relevantes Beispiel stellt die Ladungsverteilung eines Moleküls dar. Die chemische Bindung zwischen zwei Atomen dieses Moleküls kann nämlich durch die Molekülorbitaltheorie folgendermaßen beschrieben werden: Bindende Molekülorbitale, „die Bindungen“, stellen räumliche Bereiche erhöhter Elektronenaufenthaltswahrscheinlichkeit – in anderen Worten: erhöhter (negativer) Ladungsdichte – dar.

## Koordinatentransformation

Die Koordinatentransformation beschreibt den Übergang von einem Koordinatensystem in ein neues. Zumeist rechnen wir in kartesischen Koordinaten, allerdings haben wir bei den komplexen Zahlen schon Polarkoordinaten kennengelernt. Koordinatentransformationen werden angewendet, weil sich einige Probleme in bestimmten Koordinatensystemen einfacher lösen lassen als in anderen. Dabei wird häufig die „Symmetrie eines Problems“ ausgenutzt. In der Chemie treten besonders häufig sphärische Probleme auf, die Ladungsverteilung eines Wasserstoffatoms ist beispielsweise kugelsymmetrisch.

Wir betrachten also lediglich den für Chemiker\*innen besonders relevanten Übergang von kartesischen in Kugelkoordinaten. Die Integration über ein Bereich  $B \subset \mathbb{R}^2$  der Ebene erfolgt dann in Polarkoordinaten  $(r, \varphi)$  und für ein Volumenelement  $B \subset \mathbb{R}^3$  in Kugelkoordinaten  $(r, \varphi, \vartheta)$ .

Der Übergang von den kartesischen Koordinaten in Polarkoordinaten ist gegeben durch:

$$x \rightarrow r \cos(\varphi), y \rightarrow r \sin(\varphi), dx dy = r dr d\varphi.$$

Der Übergang von den kartesischen Koordinaten in Kugelkoordinaten ist gegeben durch:

$$x \rightarrow r \sin(\vartheta) \cos(\varphi), y \rightarrow r \sin(\vartheta) \sin(\varphi), z = r \cos(\vartheta), dx dy dz = r^2 \sin(\vartheta) dr d\varphi d\vartheta.$$

Die Transformation der Variablen folgt aus geometrischen Überlegungen. Für die Transformation des Flächendifferentials  $d(x, y) \rightarrow |\det(\underline{J})| d(r, \varphi)$  bzw. des Volumendifferentials  $d(x, y, z) \rightarrow |\det(\underline{J})| d(r, \varphi, \vartheta)$  wird der Betrag der Determinante der JACOBI-Matrix  $|\det(\underline{J})|$  benötigt. Das Ergebnis ist allerdings schon in der Transformationsvorschrift angegeben. Für den Übergang in Polarkoordinaten wird  $\det(\underline{J})$  folgendermaßen gebildet:

$$|\det(\underline{J})| = \left| \det \left( \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \varphi)} \right) \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \frac{\partial[r \cos(\varphi)]}{\partial r} & \frac{\partial[r \cos(\varphi)]}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial[r \sin(\varphi)]}{\partial r} & \frac{\partial[r \sin(\varphi)]}{\partial \varphi} \end{pmatrix} \right| = \left| \det \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & -r \sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & r \cos(\varphi) \end{pmatrix} \right| = r$$

Im letzten Schritt wurde der trigonometrische PHYTAGORAS verwendet. Die Bestimmung des Volumendifferentials erfolgt analog, siehe Übung 11.

## Oberflächen- und Wegintegrale

Oberflächen- und Wegintegrale sind in der Regel nicht einfach zu Berechnen, vor allem die ersteren. In den Übungen sind allerdings immer bereits Vereinfachungen vorgegeben, sodass hier lediglich das „Kochrezept“ befolgt werden muss, ohne tiefer auf die Theorie einzugehen.