2. Analysis in drei Dimensionen

2.1 Partielle Ableitung, Gradient [Lang & Pucker 7.4]

Als Verallgemeinerung vom Kapitel 1.1 wird jetzt eine Funktion $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ betrachtet. Sei f „glatt genug", d.h. stetig und (evtl. n-mal) total differenzierbar (vgl. Seite 2):

$$f(\vec{r}+\Delta\vec{r}) - f(\vec{r}) = \vec{a}(\vec{r}) \cdot \Delta\vec{r} + |\Delta\vec{r}|\, \mathcal{O}(\Delta\vec{r}) .$$

Wie durch die Wahl $\Delta\vec{r} = \varepsilon\, \vec{e}_k$, $k \in \{1,2,3\}$, gesehen werden kann, sind die Komponente von $\vec{a}(\vec{r})$ die partiellen Ableitungen (vgl. Seite 2):

$$a_k(\vec{r}) = \lim_{\varepsilon \to 0} \frac{f(\vec{r}+\varepsilon\vec{e}_k) - f(\vec{r})}{\varepsilon} =: \frac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_k} \quad ; \quad x_1 := x,\ x_2 := y,\ x_3 := z .$$

Eine alternative Bezeichnung: $\partial_k f(\vec{r}) := \dfrac{\partial f(\vec{r})}{\partial x_k}$, $k \in \{1,2,3\}$.

Der ganze Vektor $\vec{a}(\vec{r})$ wird „Gradient" von f genannt, und als

$$\vec{a}(\vec{r}) =: \nabla f(\vec{r})$$

bezeichnet. Hier ist ∇ der „Nabla-Operator":

$$\nabla := \sum_{k=1}^{3} \vec{e}_k \frac{\partial}{\partial x_k} = \sum_k \vec{e}_k \partial_k \quad \left(= \vec{\nabla} = \text{grad} \right).$$

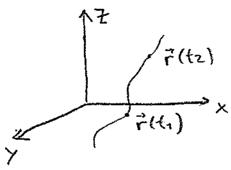
Also kurz:

$$\boxed{f(\vec{r}+\Delta\vec{r}) = f(\vec{r}) + \Delta\vec{r}\cdot\nabla f(\vec{r}) + \mathcal{O}(|\Delta\vec{r}|^2)} ,$$

wobei „$\mathcal{O}(|\Delta\vec{r}|^2)$" in der Regel als „verschwindet mindestens so schnell wie $|\Delta\vec{r}|^2$" interpretiert werden kann (vgl. Aufgabe 2.4).

— o —

Sei $\vec{r}(t)$ eine Raumkurve, $\vec{r}: \mathbb{R} \to \mathbb{R}^3$, und $f(\vec{r})$ ein Feld (z.B. die Temperatur), $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$.



Die Komposition $f(\vec{r}(t))$ ist eine Abbildung $f\circ\vec{r}: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, z.B. die Temperatur entlang der Raumkurve als Funktion der Zeit.

Was ist $\dfrac{df(\vec{r}(t))}{dt}$?

Kettenregel (EMTP I, Kap. 2.1): $(g\circ f)'(x) = g'(f(x))\, f'(x)$.

Jetzt: $\dfrac{d}{dt} f(\vec{r}(t)) = \dfrac{d}{dt} f(x(t), y(t), z(t)) = \dfrac{d}{dt} f(\{x_k(t)\})$.

(i) $x_k(t)$ differenzierbar $\Rightarrow$ $x_k(t+\Delta t) = x_k(t) + \underbrace{\dfrac{dx_k(t)}{dt}\Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)}_{=:\, \Delta x_k}$

(ii) f differenzierbar $\Rightarrow$ $f(\{x_k+\Delta x_k\}) = f(\{x_k\}) + \sum_k \Delta x_k\, \partial_k f + \mathcal{O}(|\Delta\vec{x}|^2)$.

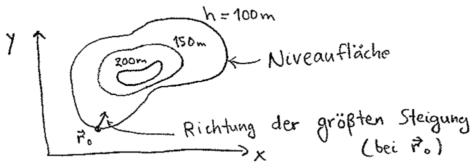
Kombiniert:
$$\frac{df(\{x_k\})}{dt} = \lim_{\Delta t\to 0} \frac{f(\{x_k(t+\Delta t)\}) - f(\{x_k(t)\})}{\Delta t}$$
$$\overset{(i)}{=} \lim_{\Delta t\to 0} \frac{f(\{x_k+\Delta x_k\}) - f(\{x_k\})}{\Delta t}$$
$$\overset{(ii)}{=} \lim_{\Delta t\to 0} \frac{\sum_k \Delta x_k \, \partial_k f + \mathcal{O}(|\Delta\vec{x}|^2)}{\Delta t}$$
$$\overset{(i)}{=} \lim_{\Delta t\to 0} \frac{\sum_k \partial_k f \, \frac{dx_k}{dt} \Delta t + \mathcal{O}(\Delta t^2)}{\Delta t} = \boxed{\sum_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt}} .$$
$$\left(= \nabla f \cdot \frac{d\vec{r}}{dt}\right)$$

Diese Formel stellt eine Verallgemeinerung der Kettenregel zu mehreren Variablen dar.

Anwendungen

Ein skalares Feld $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ definiert „Niveauflächen" (bzw. Äquipotentialflächen), auf denen $f = \text{const.}$ bleibt, sowie die „Richtung der größten Änderung" von f.

(Für $f: \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ können diese durch die Höhenlinien einer topographischen Karte illustriert werden:



)

(i) Die Richtung der größten Änderung ist genau die Richtung von ∇f.

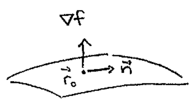
Beweis: Sei $\vec{r}(t) := \vec{r}_0 + t\vec{n}$ eine Gerade durch $\vec{r}_0$, und $\vec{n}$ ein Einheitsvektor, d.h. $|\vec{n}| = 1$.

Die Änderungsrate in Richtung $\vec{n}$:
$$\frac{df(\vec{r}_0+t\vec{n})}{dt} = \nabla f(\vec{r}_0) \cdot \frac{d(\vec{r}_0+t\vec{n})}{dt} = \vec{n} \cdot \nabla f(\vec{r}_0)$$
$$= |\vec{n}|\,|\nabla f| \cos\theta$$

Weil $-1 \le \cos\theta \le 1$ gilt, ist $\left|\frac{df}{dt}\right|$ maximal bei $|\cos\theta| = 1$, d.h. $\theta = 0$ oder $\theta = \pi$, d.h. $\vec{n} \parallel \nabla f$ ($\upuparrows$ oder $\uparrow\downarrow$) $\square$.

(ii) Der Gradient $\nabla f(\vec{r}_0)$ steht senkrecht auf die Niveaufläche durch $\vec{r}_0$.

Beweis: Sei $\vec{n}$ ein Tangentenvektor der Niveaufläche:



Weil f konstant auf der Niveaufläche bleibt, gilt
$$0 = \frac{df(\vec{r}_0+t\vec{n})}{dt} = \vec{n} \cdot \nabla f(\vec{r}_0) = |\vec{n}|\,|\nabla f| \cos\theta ,$$

d.h. $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$, d.h. $\vec{n} \perp \nabla f$ $\square$.

Höhere Ableitungen

Wenn die Funktion glatt genug ist, können auch höhere Ableitungen definiert werden.

<u>Definition:</u>

$$\partial_i \partial_j f(\vec{r}) := \frac{\partial^2 f(\vec{r})}{\partial x_i \partial x_j} := \frac{\partial}{\partial x_i}\left\{\frac{\partial}{\partial x_j} f(\vec{r})\right\}$$

$$:= \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{\partial_j f(\vec{r}+\varepsilon\vec{e}_i) - \partial_j f(\vec{r})}{\varepsilon}$$

$$= \lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\lim_{\delta\to 0} \frac{1}{\varepsilon\delta}\left[f(\vec{r}+\varepsilon\vec{e}_i+\delta\vec{e}_j) - f(\vec{r}+\varepsilon\vec{e}_i) - f(\vec{r}+\delta\vec{e}_j) + f(\vec{r})\right]\right\}.$$

<u>Behauptung:</u> $\partial_i\partial_j f(\vec{r}) = \partial_j \partial_i f(\vec{r})$, d.h. „Ableitungen vertauschen miteinander".

<u>Beweis:</u> Es wird angenommen, daß die Limes existieren und miteinander vertauschen. Dann führt eine Umordnung der Terme innerhalb der inneren Klammern zu

$$\partial_i\partial_j f = \lim_{\varepsilon\to 0}\left\{\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\varepsilon\delta}\left[f(\vec{r}+\delta\vec{e}_j+\varepsilon\vec{e}_i) - f(\vec{r}+\delta\vec{e}_j) - f(\vec{r}+\varepsilon\vec{e}_i) + f(\vec{r})\right]\right\}$$

$$= \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta}\left[\partial_i f(\vec{r}+\delta\vec{e}_j) - \partial_i f(\vec{r})\right] = \partial_j\partial_i f \qquad \Box.$$

(In der Physik ist die benötigte Annahme fast immer berechtigt.)
Beispiel: $f = xy^2$; $\partial_x f = y^2$; $\partial_y\partial_x f = 2y$; $\partial_y f = 2xy$; $\partial_x\partial_y f = 2y$.

<u>Bemerkung:</u> Die zweiten Ableitungen bilden eine 3x3-Matrix:

$$(\partial_i\partial_j f) = \begin{array}{cc} & \xrightarrow{j} \\ \downarrow i & \begin{pmatrix} \partial_1^2 f & \partial_1\partial_2 f & \partial_1\partial_3 f \\ \partial_2\partial_1 f & \partial_2^2 f & \partial_2\partial_3 f \\ \partial_3\partial_1 f & \partial_3\partial_2 f & \partial_3^2 f \end{pmatrix} \end{array}.$$

Wegen Vertauschung ($\partial_i\partial_j f = \partial_j\partial_i f$) ist die Matrix <u>symmetrisch</u>.
EMTPI $\Rightarrow$ sie kann mit einer <u>orthogonalen Basistransformation</u> (d.h. Drehung) diagonalisiert werden; die entsprechenden Eigenwerte (auf der Diagonale) sind reell.
⇨ Seite 10.

Höhere Ableitungen können ähnlich definiert werden, z.B.

$$\partial_i\partial_j\partial_k f := \frac{\partial}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_k} f \quad ;$$

die partiellen Ableitungen vertauschen wieder, und bilden somit einen symmetrischen Tensor n:ten Grades.

Taylor-Entwicklung

EMTP I, Kapitel 2.3 :
$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x-x_0)^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x-x_0)^k \left(\frac{d}{dx}\right)^k}{k!} f(x_0)$$
$$= \exp\left[(x-x_0)\frac{d}{dx}\right] f(x_0) .$$

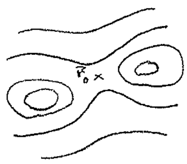
Diese Formel kann auf den Fall $f: \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ verallgemeinert werden!

Im Allgemeinen :
$$f(\vec r) = f(x,y,z)$$
$$\overset{\text{Taylor bzgl. } x}{=} \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x}\right] f(x_0,y,z)$$
$$\overset{\text{Taylor bzgl. } y,z}{=} \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x}\right]\exp\left[(y-y_0)\frac{\partial}{\partial y}\right]\exp\left[(z-z_0)\frac{\partial}{\partial z}\right] f(x_0,y_0,z_0)$$
$$= \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x} + (y-y_0)\frac{\partial}{\partial y} + (z-z_0)\frac{\partial}{\partial z}\right] f(x_0,y_0,z_0)$$
$$\Leftrightarrow \boxed{f(\vec r + \Delta\vec r) = \exp(\Delta\vec r\cdot\nabla)\, f(\vec r)} \qquad (*) .$$

Explizit zur zweiten Ordnung (sei $\Delta\vec r \neq \vec 0$ auch nur in zwei Richtungen):
$$f(\vec r + \Delta x_i \vec e_i + \Delta x_j \vec e_j) \overset{\text{Taylor bzgl. } \Delta x_j}{=} f(\vec r + \Delta x_i \vec e_i) + \Delta x_j \partial_j f(\vec r + \Delta x_i \vec e_i) + \frac{(\Delta x_j)^2}{2}\partial_j^2 f(\vec r + \Delta x_i \vec e_i) + \ldots$$
$$\overset{\text{Taylor bzgl. } \Delta x_i}{=} f(\vec r) + \Delta x_i \partial_i f(\vec r) + \frac{(\Delta x_i)^2}{2}\partial_i^2 f(\vec r) + \ldots$$
$$+ \Delta x_j\left[\partial_j f(\vec r) + \Delta x_i \partial_i\partial_j f(\vec r) + \ldots\right]$$
$$+ \frac{(\Delta x_j)^2}{2}\partial_j^2 f(\vec r) + \ldots$$
$$\overset{\partial_i\partial_j f = \frac{1}{2}(\partial_i\partial_j + \partial_j\partial_i) f}{=} f(\vec r) + \Delta\vec r\cdot\nabla f(\vec r) + \frac{1}{2}(\Delta x_i\ \Delta x_j)\begin{pmatrix}\partial_i^2 f & \partial_i\partial_j f\\ \partial_j\partial_i f & \partial_j^2 f\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Delta x_i\\ \Delta x_j\end{pmatrix} + \ldots$$

Der Term der zweiten Ordnung kann formal auch als $\frac{1}{2}(\Delta x_i\partial_i + \Delta x_j\partial_j)^2 f$ ausgedrückt werden $\Rightarrow$ stimmt mit $(*)$ überein!

Anwendung: Sei $\vec r_0$ ein „Sattelpunkt" : $\nabla f(\vec r_0) = \vec 0$.



D.h., f bleibt zur ersten Ordnung konstant in <u>allen</u> Richtungen.

Dann bestimmt die Matrix $(\partial_i\partial_j f(\vec r_0)) =: M$ das Verhalten der Funktion :
$$f(\vec r + \Delta\vec r) = f(\vec r) + \frac{1}{2}(\Delta r)^T M\, \Delta r + O(|\Delta\vec r|^3)$$

EMTP I, Kap. 3.5 : $O^T M O = \begin{pmatrix}\lambda_1 & 0\\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}$
(„Hauptachsentransformation")
$$= f(\vec r) + \frac{1}{2}\lambda_1(\Delta x_1')^2 + \frac{1}{2}\lambda_2(\Delta x_2')^2 + O(|\Delta\vec r|^3)$$

z.B. für $\lambda_1 > 0$, $\lambda_2 < 0$: