Höhere Ableitungen

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

Definition:

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

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

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

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

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

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

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

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

Bemerkung: Die zweiten Ableitungen bilden eine 3x3-Matrix:

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

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

⇨ Seite 6.

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 3:ten Grades.

Taylor-Entwicklung

MMP I, Kapitel 2.4 :

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

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

Im Allgemeinen :

$$f(\vec{r}) = f(x,y,z)$$

Taylor bzgl. x

$$= \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x}\right] f(x_0,y,z)$$

Taylor bzgl. y, z

$$= \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x}\right]\exp\left[(y-y_0)\frac{\partial}{\partial y}\right]\exp\left[(z-z_0)\frac{\partial}{\partial z}\right] f(x_0,y_0,z_0)$$

$$= \exp\left[(x-x_0)\frac{\partial}{\partial x} + (y-y_0)\frac{\partial}{\partial y} + (z-z_0)\frac{\partial}{\partial z}\right] f(x_0,y_0,z_0)$$

$$\Leftrightarrow \quad \boxed{f(\vec{r}+\Delta\vec{r}) = \exp(\Delta\vec{r}\cdot\nabla) f(\vec{r})} \qquad (*) .$$

Explizit zur zweiten Ordnung (sei $\Delta\vec{r} \neq \vec{0}$ auch nur in zwei Richtungen):

Taylor bzgl. Δx_j

$$f(\vec{r} + \Delta x_i \vec{e}_i + \Delta x_j \vec{e}_j) = f(\vec{r}+\Delta x_i\vec{e}_i) + \Delta x_j \partial_j f(\vec{r}+\Delta x_i \vec{e}_i) + \frac{(\Delta x_j)^2}{2}\partial_j^2 f(\vec{r}+\Delta x_i\vec{e}_i) + \ldots$$

Taylor bzgl. Δx_i

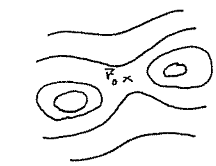
$$= f(\vec{r}) + \Delta x_i \partial_i f(\vec{r}) + \frac{(\Delta x_i)^2}{2}\partial_i^2 f(\vec{r}) + \ldots$$
$$+ \Delta x_j \left[\partial_j f(\vec{r}) + \Delta x_i \partial_i \partial_j f(\vec{r}) + \ldots\right]$$
$$+ \frac{(\Delta x_j)^2}{2}\partial_j^2 f(\vec{r}) + \ldots$$

$\partial_i\partial_j f = \frac{1}{2}(\partial_i\partial_j + \partial_j\partial_i) f$

$$= f(\vec{r}) + \Delta\vec{r}\cdot\nabla f(\vec{r}) + \frac{1}{2}(\Delta x_i \; \Delta x_j)\begin{pmatrix} \partial_i^2 f & \partial_i\partial_j f \\ \partial_j\partial_i f & \partial_j^2 f \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\Delta x_i \\ \Delta x_j\end{pmatrix} + \ldots$$

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" (bzw. „Extremstelle") : $\nabla f(\vec{r}_0) = \vec{0}$.

D.h., f bleibt zur ersten Ordnung konstant in allen Richtungen.

Dann bestimmt die Matrix $(\partial_i\partial_j f(\vec{r}_0)) =: M$ das Verhalten der Funktion :

$$f(\vec{r}+\Delta\vec{r}) = f(\vec{r}) + \frac{1}{2}(\Delta r)^T M \,\Delta r + \mathcal{O}(|\Delta\vec{r}|^3)$$

MMP I, Kap. 3.6: $O^T M O = \begin{pmatrix}\lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2\end{pmatrix}$ („Hauptachsentransformation")

$$\stackrel{!}{=} f(\vec{r}) + \frac{1}{2}\lambda_1 (\Delta x_1')^2 + \frac{1}{2}\lambda_2(\Delta x_2')^2 + \mathcal{O}(|\Delta\vec{r}|^3)$$

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