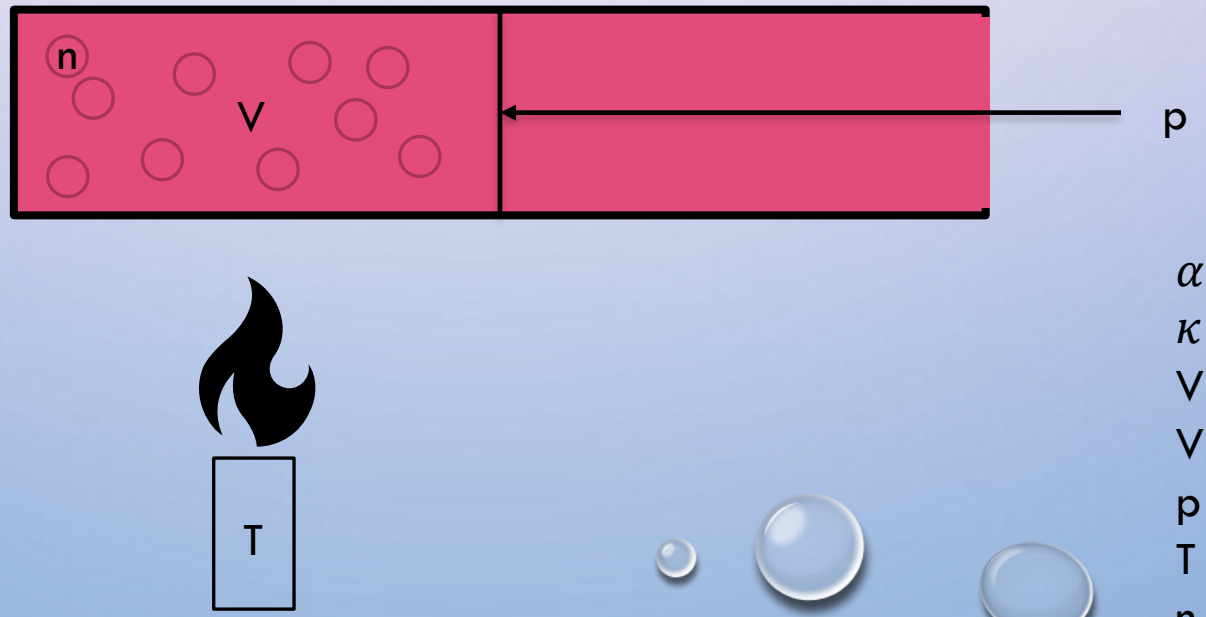
MATHEMATIK I

PARTIELLE DIFFERENTIALE

THERMODYNAMIK

$$dV = \alpha V\, dT - \kappa V\, dp + V_{mol}\, dn$$



α	Expansionskoeffizient
κ	Kompressabilität
Vmol	molares Volumen
V	Volumen
p	Druck
T	Temperatur
n	Teilchenzahl (mol)

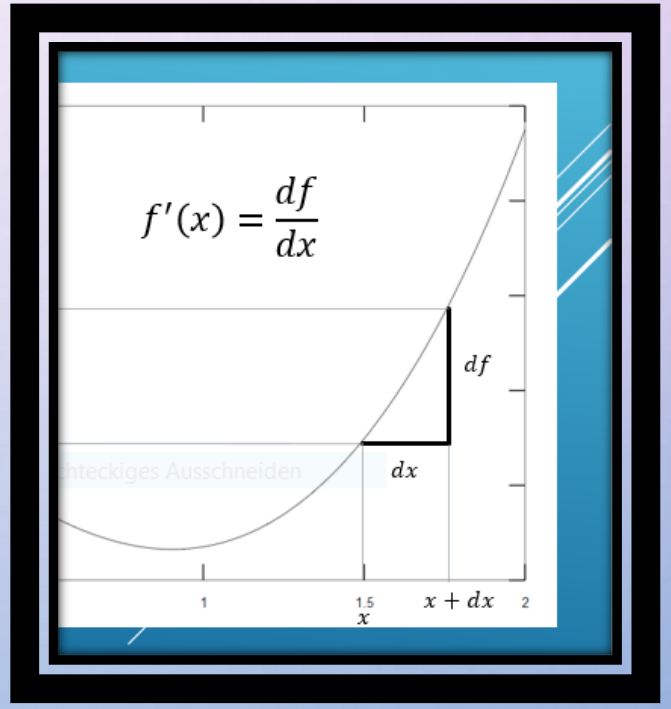
WIEDERHOLUNG: DIFFERENTIAL

Die Ableitung f‘(x) einer Funktion gibt an, wie sich der Funktionswert f(x) ändert (Änderung ist df), wenn ich ein wenig am „Input x wackle“ (Änderung ist dx). Es gilt

$$df = f'(x) \cdot dx,$$

wobei dx und df infinitesimale Zahlen (Differentiale) sind.

Was aber, wenn f von mehreren Inputgrößen abhängt?

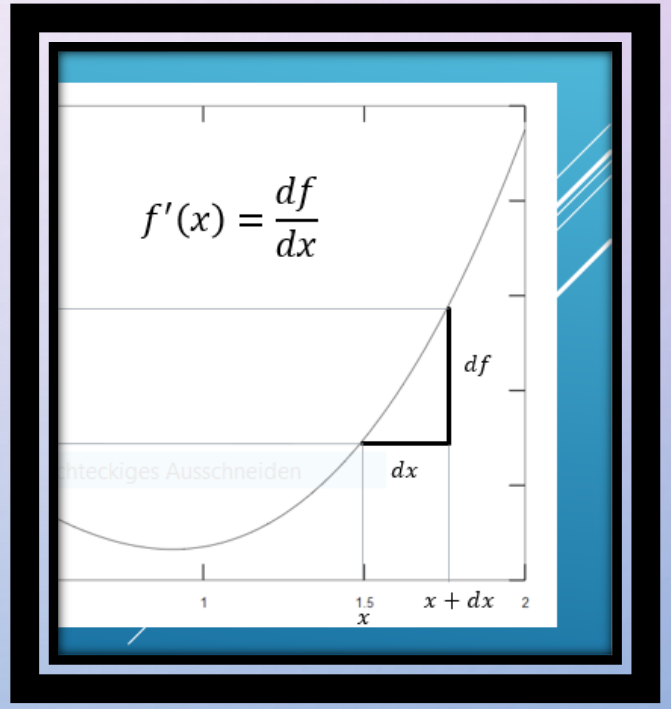


TOTALES DIFFERENTIAL

Wenn f von mehreren Inputgrößen (z.B. x, y und z) abhängt, dann muss man diesen Ausdruck $df = f'(x) \cdot dx$ entsprechend (wie bei dV) ergänzen zu:

$$dV = \alpha V\, dT - \kappa V\, dp + V_{mol}\, dn$$

Hier wird angenommen, dass sich Temperatur-, Druck- und Teilchenzahländerungen verschieden stark auf die Änderung des Volumens auswirken und auch, dass bei gleichzeitiger Änderung dieser Parameter sich die Einzeleinflüsse $\alpha V\, dT, -\kappa V\, dp$ und $V_{mol}\, dn$ addieren. Es ist vielleicht beim Volumen so der Fall, aber dass diese Additivität für allgemeine physikalische Größen gilt, ist nicht gesagt / ist nicht offensichtlich. X



BERECHNUNG: PARTIELLE DIFFERENTIALE

Wir wollen jetzt konkret das totale Differential $df = f_x(x,y,z) \cdot dx + f_y(x,y,z) \cdot dy + f_z(x,y,z) \cdot dz$ für die Funktion $\boldsymbol{f(x,y,z) = \frac{x^2+xy+z}{z^2}}$ berechnen. Welchen Einfluss hat also eine infinitesimale Änderung von z.B. x auf diese Funktion? Das kann man herausfinden, indem man y und z als konstant betrachtet und die Funktion ganz üblich nach x ableitet. Man schreibt für dieses partielle Differential auch

<u>Aufgabe</u>: Probieren Sie selber die partielle Ableitung von f nach x auszurechnen, bevor Sie zur nächsten Folie wechseln!
Betrachten Sie also y und z als konstant und leiten Sie f nach x ab!

$$f_x(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} = \ ?$$

Ein „kleines d“ nur etwas „rund geschrieben“.
Diese Ausdrücke heißt: **„Die partielle Ableitung von f nach x.“**

BERECHNUNG: PARTIELLE DIFFERENTIALE

$$f(x,y,z) = \frac{x^2 + xy + z}{z^2}$$

$$f_x(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} = \frac{2x + y}{z^2}$$

Warum kommt das raus?

In diesem Fall denkt man sich die Funktion f am besten als $f(x,y,z) = \frac{1}{z^2}x^2 + \frac{y}{z^2}x + \frac{1}{z}$. Jetzt sieht man, dass $\frac{1}{z^2}$ und $\frac{y}{z^2}$ konstante Faktoren sind (Konstante-Faktor-Regel). Wir haben ein Polynom in x. Der konstante *Summand* $\frac{1}{z}$ fällt beim Ableiten weg. Er hängt nicht von x ab.

X

BERECHNUNG: PARTIELLE DIFFERENTIALE

$$\boldsymbol{f(x,y,z) = \frac{x^2 + xy + z}{z^2}}$$

$$f_x(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial x} = \frac{2x + y}{z^2}$$

$$f_y(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial y} = \frac{x}{z^2}$$

$$f_z(x,y,z) = \frac{\partial f(x,y,z)}{\partial z} = \frac{1 \cdot z^2 - 2z \cdot (x^2 + xy + z)}{z^4}$$

In diesem Fall schreibt man die Funktion f als $\boldsymbol{f(x,y,z) = \frac{x}{z^2}y + \frac{x^2+z}{z^2}}$. X

Dieses Mal steht die Größe z, nach der abgeleitet wird, im Zähler und im Nenner von f. Daher ist die Quotientenregel anzuwenden. Bitte beachten Sie, dass der Zähler von f die Struktur „z + Konstante“ hat und daher abgeleitet 1 ergibt. X

EINSETZEN DER TERME ERGIBT

$$df = f_x(x,y,z) \cdot dx + f_y(x,y,z) \cdot dy + f_z(x,y,z) \cdot dz$$

$$= \frac{2x+y}{z^2}\, dx + \frac{x}{z^2}\, dy + \frac{z^2 - 2z \cdot (x^2 + xy + z)}{z^4}\, \mathrm{dz}$$

als **totales Differential erster Ordnung** von der Funktion:

$$\boldsymbol{f(x,y,z) = \frac{x^2 + xy + z}{z^2}}$$

SCHREIBWEISE IN DER THERMODYNAMIK

Damit bei den partiellen Ableitungen klar ist, welche Größen konstant gehalten werden, schreibt man in der Thermodynamik die konstant gehaltenen Größen unten an das partielle Differential. Aus dem Zusammenhang

$$dV = \alpha V\, dT - \kappa V\, dp + V_{mol}\, dn$$

folgt also

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,n} = \alpha V, \qquad \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,n} = -\kappa V, \qquad \left(\frac{\partial V}{\partial n}\right)_{p,T} = V_{mol}$$

Diese Gleichung bedeutet:
Ändert man die Temperatur um dT und lässt dabei Druck p und Teilchenzahl n konstant, dann ändert sich das Volumen um $dV = \alpha V\, dT$.

TOTALES DIFFERENTIAL HÖHERER ORDNUNG

Der Ausdruck $df = f_x(x,y) \cdot dx + f_y(x,y) \cdot dy$ ist das totale Differential erster Ordnung. Es ist so etwas wie die erste Ableitung von f in mehreren (hier 2 wegen x und y) Dimensionen. Es gibt auch totale Differentiale höherer Ordnung. So kann man auch analog zur zweiten Ableitung einer Funktion ausrechnen, wie der differentielle Anstieg von f *ansteigt*, wenn man an den Inputgrößen x und y wackelt. Also, was ist d(df)? (Das totale Differential zweiter Ordnung)

$$d^2f = d(df) = d\big(f_x(x,y) \cdot dx + f_y(x,y) \cdot dy\big)$$

$$= \left(\frac{\partial(df)}{\partial x}\right) dx + \left(\frac{\partial(df)}{\partial y}\right) dy$$

TOTALES DIFFERENTIAL HÖHERER ORDNUNG

Der Ausdruck $df = f_x(x,y) \cdot dx + f_y(x,y) \cdot dy$ ist das totale Differential erster Ordnung. Es ist so etwas wie die erste Ableitung von f in mehreren (hier 2 wegen x und y) Dimensionen. Es gibt auch totale Differentiale höherer Ordnung. So kann man auch analog zur zweiten Ableitung einer Funktion ausrechnen, wie der differentielle Anstieg von f *ansteigt*, wenn man an den Inputgrößen x und y wackelt. Also, was ist d(df)? (Das totale Differential zweiter Ordnung)

$$d^2f = d(df) = d\big(f_x(x,y) \cdot dx + f_y(x,y) \cdot dy\big)$$

$$= \underbrace{\big(f_{xx}(x,y) \cdot dx + f_{yx}(x,y) \cdot dy\big)\, dx}_{\left(\frac{\partial(df)}{\partial x}\right) dx} + \underbrace{\big(f_{xy}(x,y) \cdot dx + f_{yy}(x,y) \cdot dy\big)\, dy}_{\left(\frac{\partial(df)}{\partial y}\right) dy} = f_{xx}\, dx^2 + \big(f_{xy} + f_{yx}\big)dx\, dy + f_{yy}dy^2$$

Um das totale Differential zweiter Ordnung auszurechnen, muss man also alle zweiten partiellen Ableitungen ausrechnen und dann in den Ausdruck $f_{xx}\, dx^2 + \big(f_{xy} + f_{yx}\big)dx\, dy + f_{yy}dy^2$ „reinschreiben“. Viel Fleißarbeit…

Selber probieren!!

BEISPIEL - AUFGABE

Das totale Differential erster und zweiter Ordnung ist zu rechnen von $f(x,y) = x^2 \cdot \sin(xy)$

$f_x = ?$ (Produktregel für $x^2 \cdot \sin(xy)$ und Kettenregel für $\sin(xy)$)
$f_y = ?$ (Konstante-Faktor-Regel für x^2 und Kettenregel für $\sin(xy)$)

Jetzt muss man JEDEN dieser beiden Ausdrücke JEWEILS nach x und y ableiten. Also zunächst für f_x:

$f_{xx} = ?$ (die Ableitung von f_x nach x)
$f_{xy} = ?$ (die Ableitung von f_x nach y)

Spätestens an dieser Stelle wird klar, dass man Disziplin und Frustrationstoleranz braucht. Aber jetzt für f_y:

$f_{yx} = ?$ (die Ableitung von f_y nach x) Oh Wunder… das ist das gleiche wie f_{xy}
$f_{yy} = ?$ (die Ableitung von f_y nach y)

BEISPIEL - LÖSUNG

Das totale Differential erster und zweiter Ordnung ist zu rechnen von $f(x,y) = x^2 \cdot \sin(xy)$

$f_x = 2x \cdot \sin(xy) + x^2 \cdot \cos(xy) \cdot y$ (Produktregel für $x^2 \cdot \sin(xy)$ und Kettenregel für $\sin(xy)$)
$f_y = x^2 \cdot \cos(xy) \cdot x = x^3 \cos(xy)$ (Konstante-Faktor-Regel für x^2 und Kettenregel für $\sin(xy)$)

Jetzt muss man JEDEN dieser beiden Ausdrücke JEWEILS nach x und y ableiten. Also zunächst für f_x:

Hier mit cymath nachvollziehen!

$f_{xx} = 2\sin(xy) + 2x\cos(xy)\,y + 2x\cos(xy)\,y - x^2\sin(xy)\,y^2$ (die Ableitung von f_x nach x)
$f_{xy} = 2x\cos(xy)\,x - x^2\sin(xy)\,xy + x^2\cos(xy) = 3x^2\cos(xy) - x^3 y\sin(xy)$ (die Ableitung von f_x nach y)

Spätestens an dieser Stelle wird klar, dass man Disziplin und Frustrationstoleranz braucht. Aber jetzt für f_y:

$f_{yx} = 3x^2\cos(xy) - x^3 y\sin(xy)$ (die Ableitung von f_y nach x) Oh Wunder… das ist das gleiche wie f_{xy}
$f_{yy} = -x^3\sin(xy)\,x = -x^4\sin(xy)$ (die Ableitung von f_y nach y)

BEISPIEL FORTSETZUNG

Wenn man jetzt also alle ersten partiellen Ableitungen f_x und f_y ausgerechnet hat, dann kann man damit das totale Differential erster Ordnung aufschreiben:

$$\boldsymbol{df} = (2x\sin(xy) + x^2 y\cos(xy))\,\boldsymbol{dx} + x^3\cos(xy)\,\boldsymbol{dy}$$

Bei dem totalen Differential zweiter Ordnung sieht man, dass die beiden „gemischten zweiten partiellen Ableitungen“ f_{xy} und f_{yx} identisch waren (das ist meistens so… das sehen wir noch). Also kann man schreiben:

$$d^2 f = f_{xx}\,dx^2 + 2f_{xy}\,dx\,dy + f_{yy}dy^2$$

Was in unserem Beispiel folgendes ergibt:

$$\boldsymbol{d^2 f} = (2\sin(xy) + 4xy\cos(xy) - x^2y^2\sin(xy))\,\boldsymbol{dx^2} + 2(3x^2\cos(xy) - x^3 y\sin(xy))\,\boldsymbol{dx\,dy} - x^4\sin(xy)\,\boldsymbol{dy^2}$$

KRASS!!! Dafür, dass es „nur“ die zweite Ableitung einer sehr einfachen Funktion sein soll….

SATZ VON SCHWARZ

Der Ausdruck f_{xyyxy} bedeutet, dass man die Funktion zunächst nach x partiell ableitet. Dann 2 Mal nach y und schließlich wieder einmal nach x und einmal nach y ableitet. Spielt die Reihenfolge der Ableitungen keine Rolle? Ist zum Beispiel $f_{xyyxy} = f_{xxyyy}$? Die Antwort ist: Für die meisten Funktionen, die wir kennenlernen werden, ja. Das ist der sogenannte Satz von Schwarz. Doch damit man diese Vertauschungen der Ableitungsreihenfolge vornehmen darf, bedarf es einiger Voraussetzungen.

$$\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{p,n} = \alpha V, \qquad \left(\frac{\partial V}{\partial p}\right)_{T,n} = -\kappa V, \qquad \left(\frac{\partial V}{\partial n}\right)_{p,T} = V_{mol}$$

$$dV = \alpha V\, dT - \kappa V\, dp + V_{mol}\, dn$$

Partielle Einflüsse addieren sich auf zu einem totalen Differential. Ist das immer so?

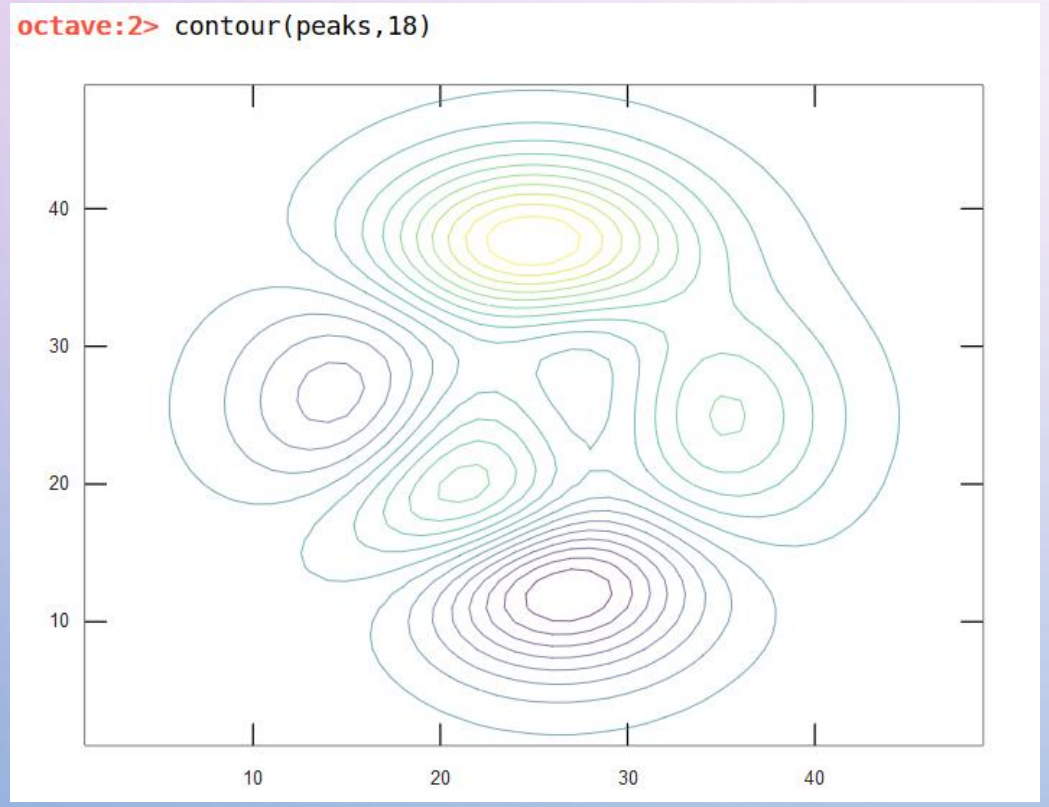
SATZ VON SCHWARZ

Der **Satz von Schwarz** macht jetzt eine Aussage darüber, wann sich die partiellen Einflüsse additiv auf das Gesamtverhalten der Funktion auswirken und wann man Ableitungen vertauschen darf:

„Wenn die k-ten partiellen Ableitungen auf einem (offenen) Definitionsbereich der Funktion f jeweils stetige Funktionen (ohne Sprünge, Definitionslücken, Pole) ergeben, dann existiert auch (auf dem Definitionsbereich) das totale Differential k-ter Ordnung und die Reihenfolge der partiellen Ableitungen spielt keine Rolle.“

Der Definitionsbereich einer unktion ist sozusagen der „Inputbereich“. Aus welcher Menge dürfen die Inputgrößen stammen (z.B. macht nur eine positive Teilchenzahl Sinn)?
„Offener Definitionsbereich“ bedeutet, dass wenn ein Punkt x zum Definitionsbereich gehört, dann auch immer ein Intervall „rund um x“. X

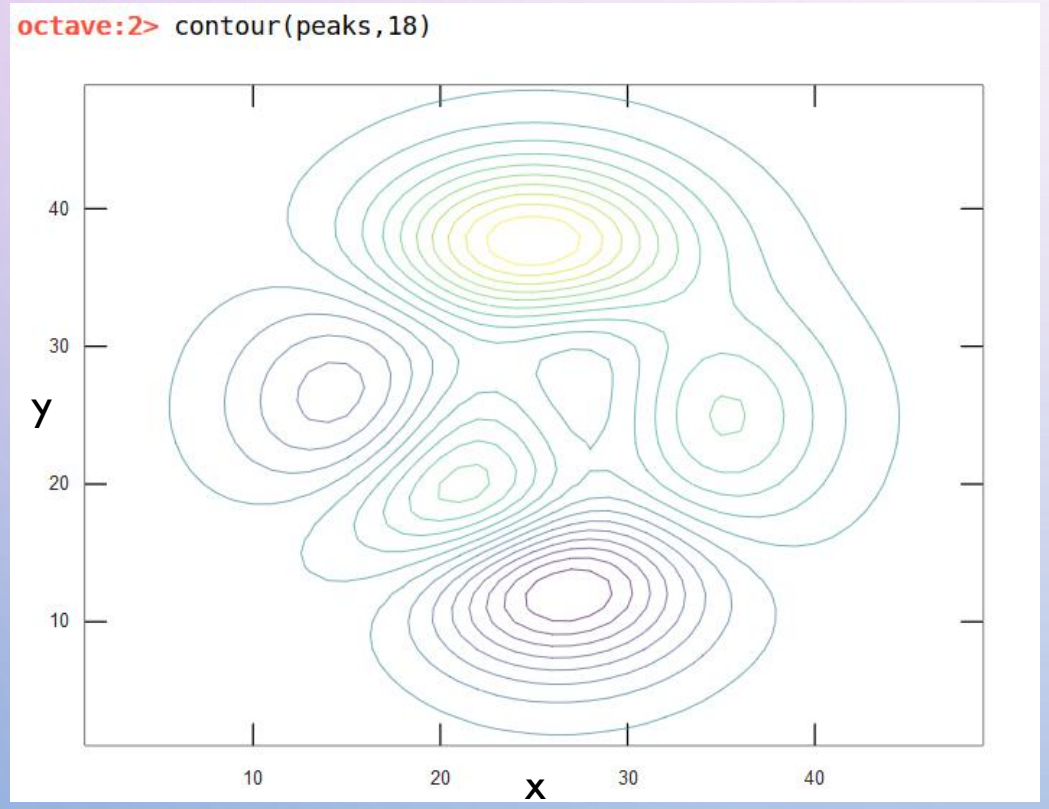
LINIEN, DIE KEINE FUNKTIONEN SIND



Manchmal sind die Zusammenhänge zwischen „Input“- und „Outputgrößen“ eines Systems komplizierter. Solche Graphen, wie diese hier, in denen man unterschiedliche Linien produziert hat, entstehen z.B. so: Man macht ein chemisch-physikalisches Experiment und notiert dabei, wie sich zwei gemessene Parameter zeitlich verändern. Dadurch erhält man eine(!) der abgebildeten Linien. Dann variiert man den Versuch ein wenig und misst erneut… eine andere dieser Linien kommt dabei raus usw.

Hier ein Beispiel aus der Thermodynamik

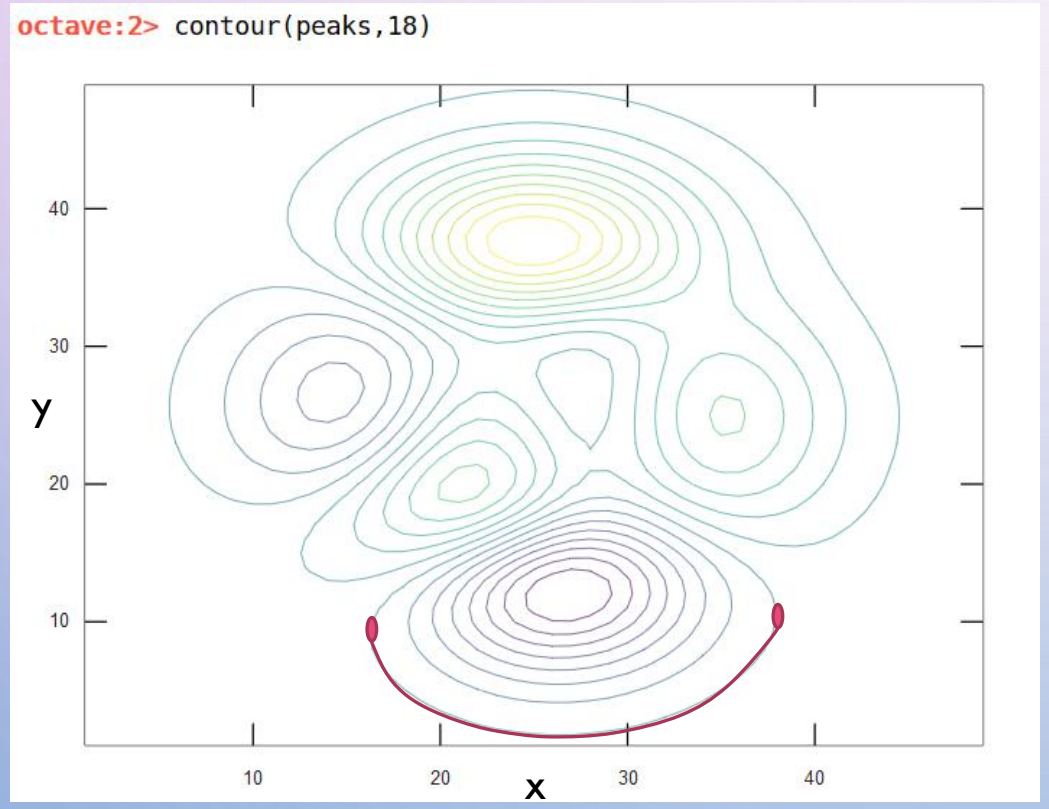
LINIEN, DIE KEINE FUNKTIONEN SIND



Will man diese Zusammenhänge in Form einer Funktion beschreiben, bekommt man Probleme. Die Linien sind keine Funktionsgraphen. Bei einer Funktion wird jedem Inputwert genau(!) ein Outputwert zugeordnet.

Dennoch kann man Teilstücke dieser Linien als Funktionsgraphen interpretieren… Finden Sie solche Teilstücke in der Grafik?

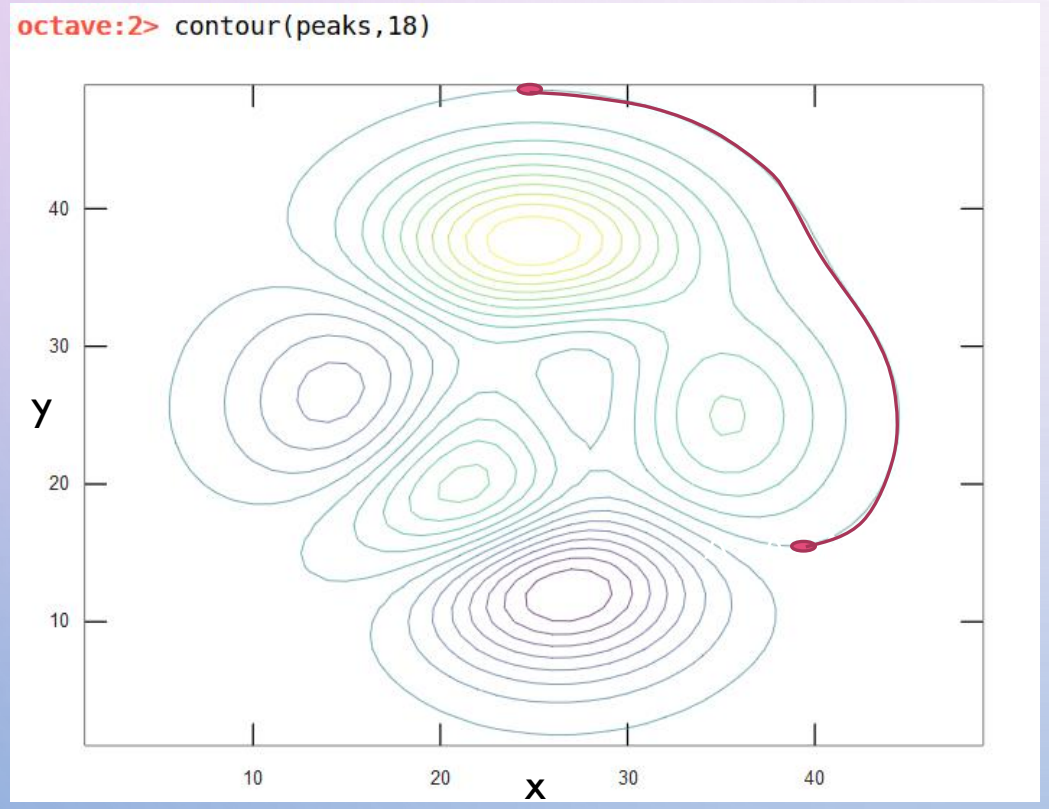
„FINDE DIE FUNKTION“



Dieses Teilstück z.B. ist eine Funktion y(x). Jedem x-Wert (Definitionsbereich zwischen ca. 17 und 38) wird genau ein y-Wert (Wertebereich zwischen ca. 0 und 10) zugeordnet.

Das geht solange gut, bis die Tangente an die Linie parallel zur y-Achse verläuft. Also nur zwischen den beiden markierten Punkten.

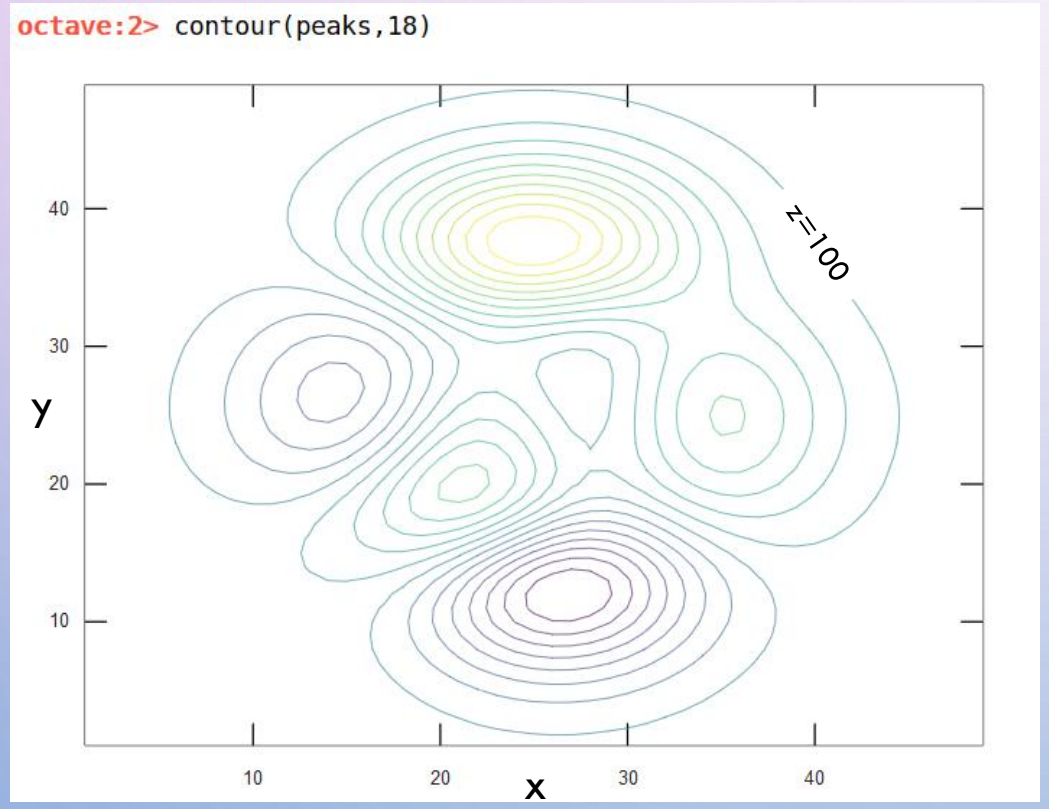
„FINDE DIE FUNKTION“



Oder dieses Teilstück. Hier ist eine Funktion x(y) zu sehen. Jedem y-Wert (Definitionsbereich ca. 15 bis 50) wird genau ein x-Wert (Wertebereich ca. 25 bis 45) zugeordnet.

Das geht solange gut, bis die Tangente an die Linie parallel zur x-Achse verläuft. Also nur zwischen den beiden markierten Punkten.

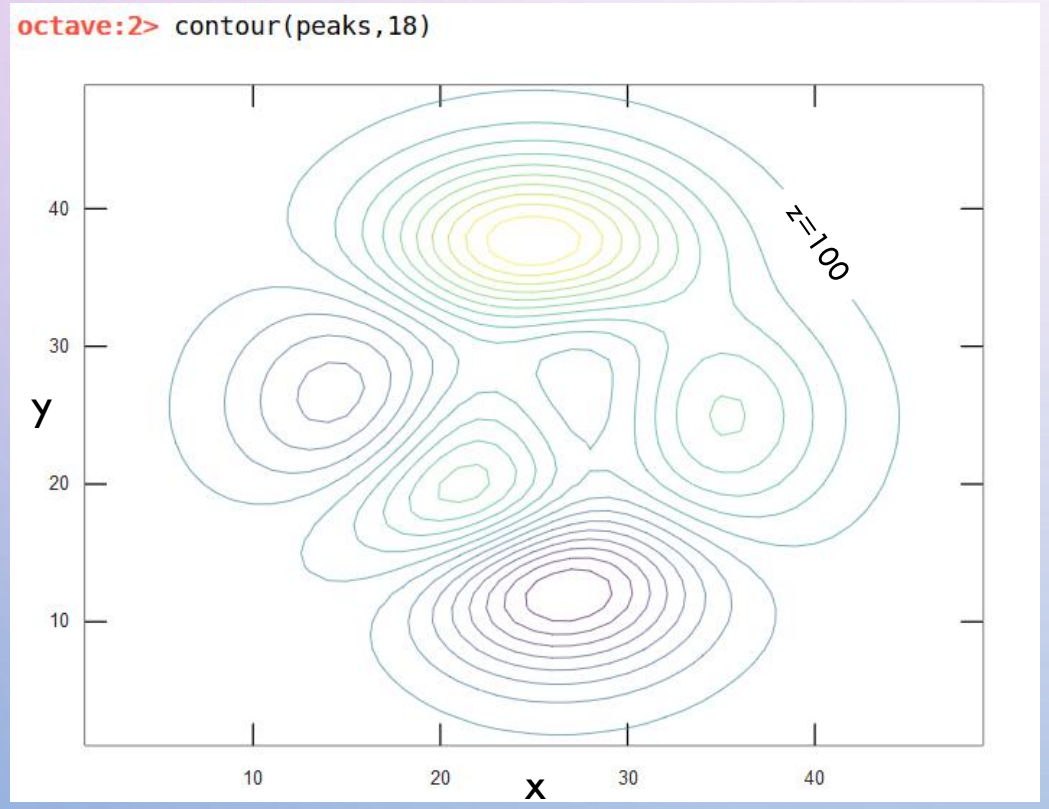
DER TRICK: HÖHENLINIEN



Der Trick bei der Interpretation solcher Graphen, besteht darin, sich die Linien als Höhenlinien eines Gebirges vorzustellen. Wenn eine Person im Gebirge entlang solcher Linien laufen würde, dann würde sie sich immer auf gleicher Höhe (über dem Meeresspiegel) befinden. Anstatt also x(y) oder y(x) aufschreiben zu wollen, schreibt man z=f(x,y).

Die Höhe z über dem Meeresspiegel hängt von den Koordinaten (x,y) der wandernden Person ab. Sie ist also eine Funktion(!) von x und y. Jeder Koordinate (x,y) ist genau eine Höhe z zuzuordnen.

EXPLIZIT VERSUS IMPLIZIT

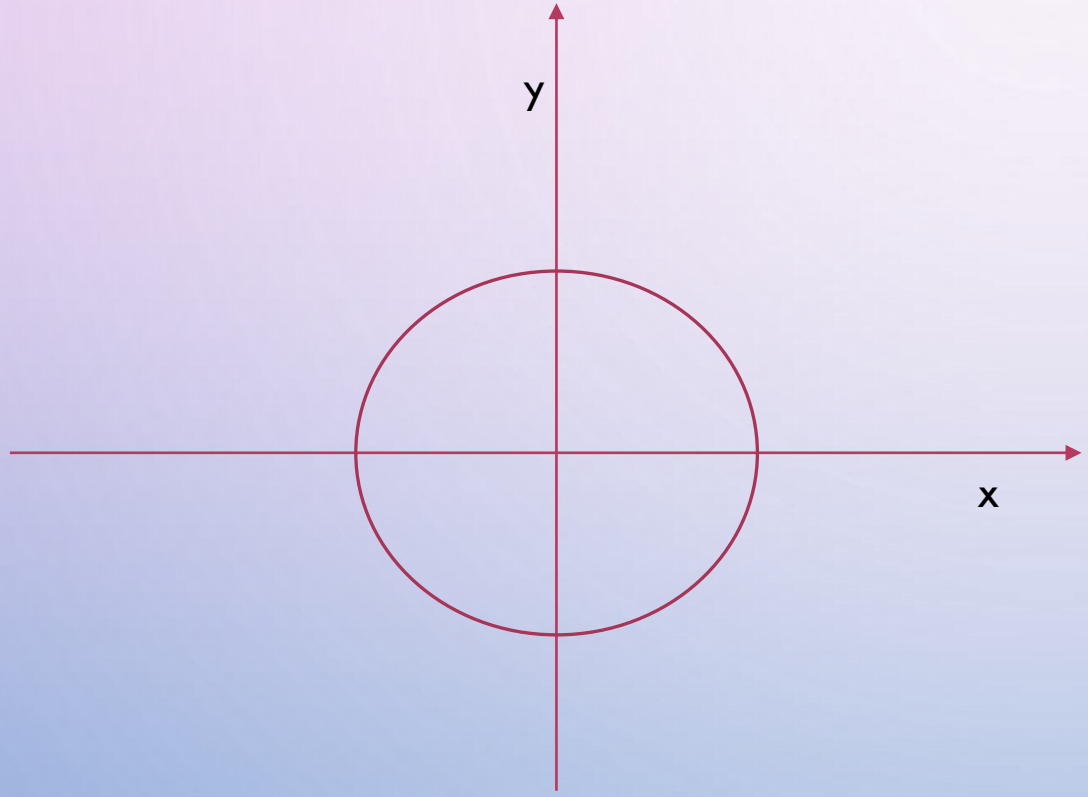


Es gibt jetzt also 2 Möglichkeiten, die Abhängigkeit zwischen x und y auszudrücken.

Entweder „explizit“ als Funktion x(y) oder y(x). (Explizite Funktionen)

Oder der Zusammenhang ergibt sich (z.B) aus der Gleichung 100=f(x,y). Einen solchen Zusammenhang zwischen x und y würde man „implizit“ oder implizite Funktion nennen.

BEISPIEL: KREIS

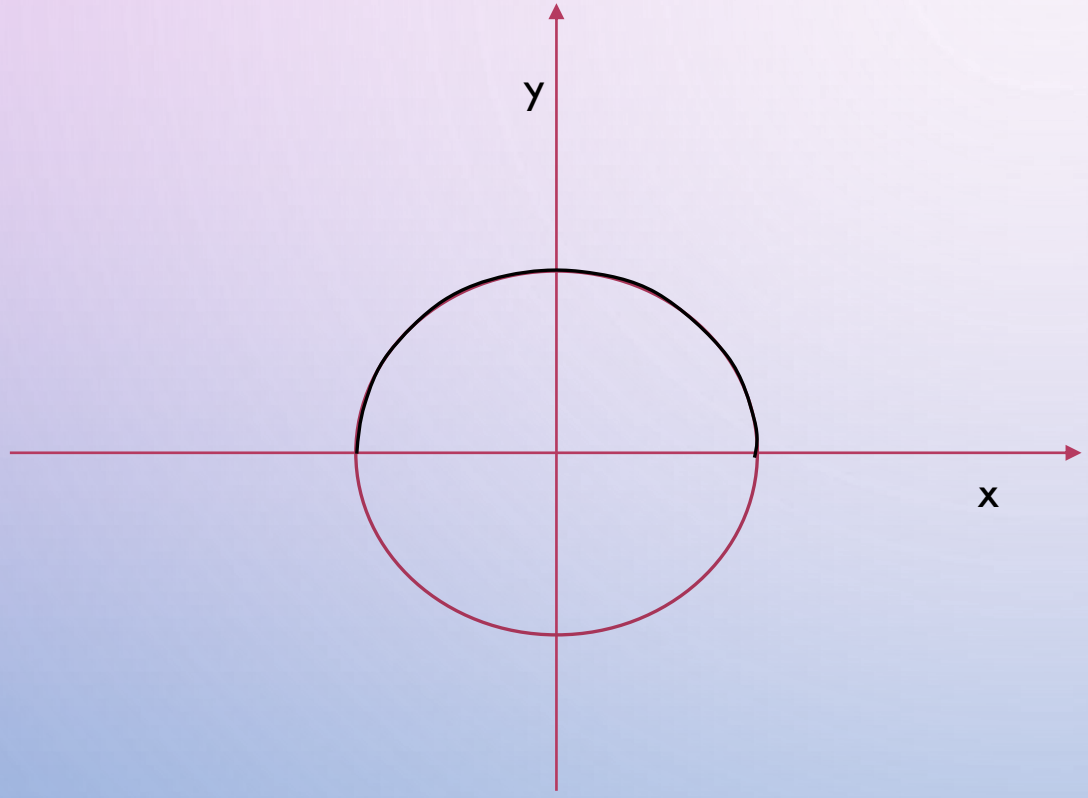


Gut lässt sich das anhand eines Kreises erklären.

Die Kreisgleichung lautet hier $x^2+y^2=r^2$, wobei r der Radius des Kreises ist. Diese Gleichung ist bei gegebenem r eine implizite Funktion in x und y. (Die Formel ist nicht nach x oder y umgestellt worden)

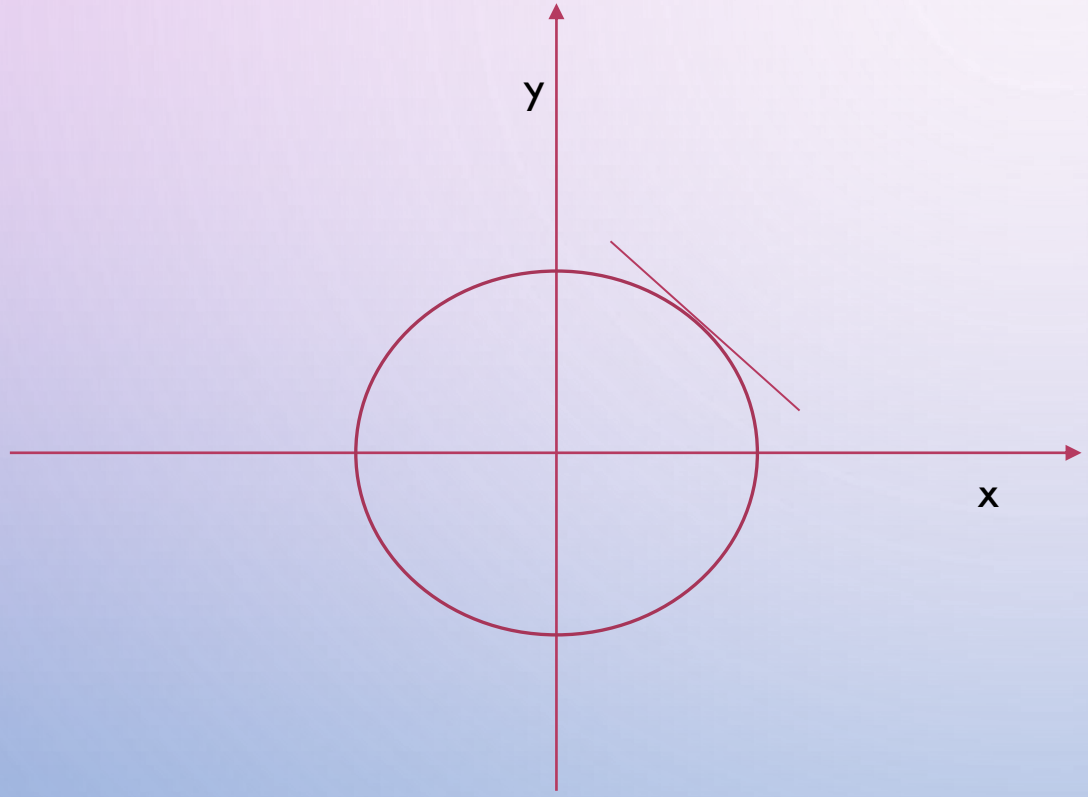
Tatsächlich ist die Kreislinie auch kein Funktionsgraph.

BEISPIEL: KREIS



Ein Teil dieser Kreislinie lässt sich jedoch als Funktion auffassen $y = \sqrt{r^2 - x^2}$. Dabei geht der Definitionsbereich von –r bis r und der Wertebereich von 0 bis r. Dieses wäre eine explizite Funktion y(x), die jedoch nur einen Teil der Kreislinie darstellt. $y = \pm\sqrt{r^2 - x^2}$ ist KEINE Funktion y(x), da nicht jedem x eindeutig(!) ein y zugeordnet wird.

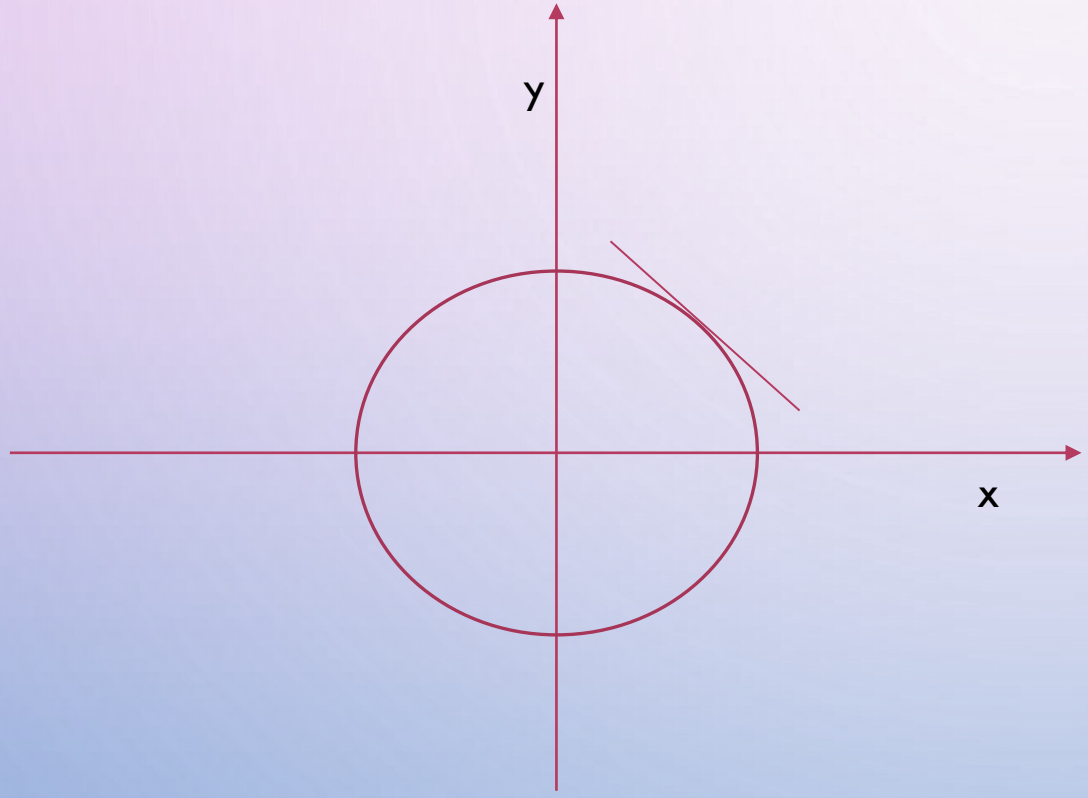
IMPLIZITES ABLEITEN



Das Lustige ist, dass man die explizite Funktion y(x) auch nach x ableiten kann, ohne die Gleichung $x^2+y^2=r^2$ nach y umstellen zu müssen!

Die implizite Funktion lautet $f(x,y)=x^2+y^2$. Der gezeigte Kreis ist eine Höhenlinie dieser Funktion (für einen festen Radius r).

IMPLIZITES ABLEITEN



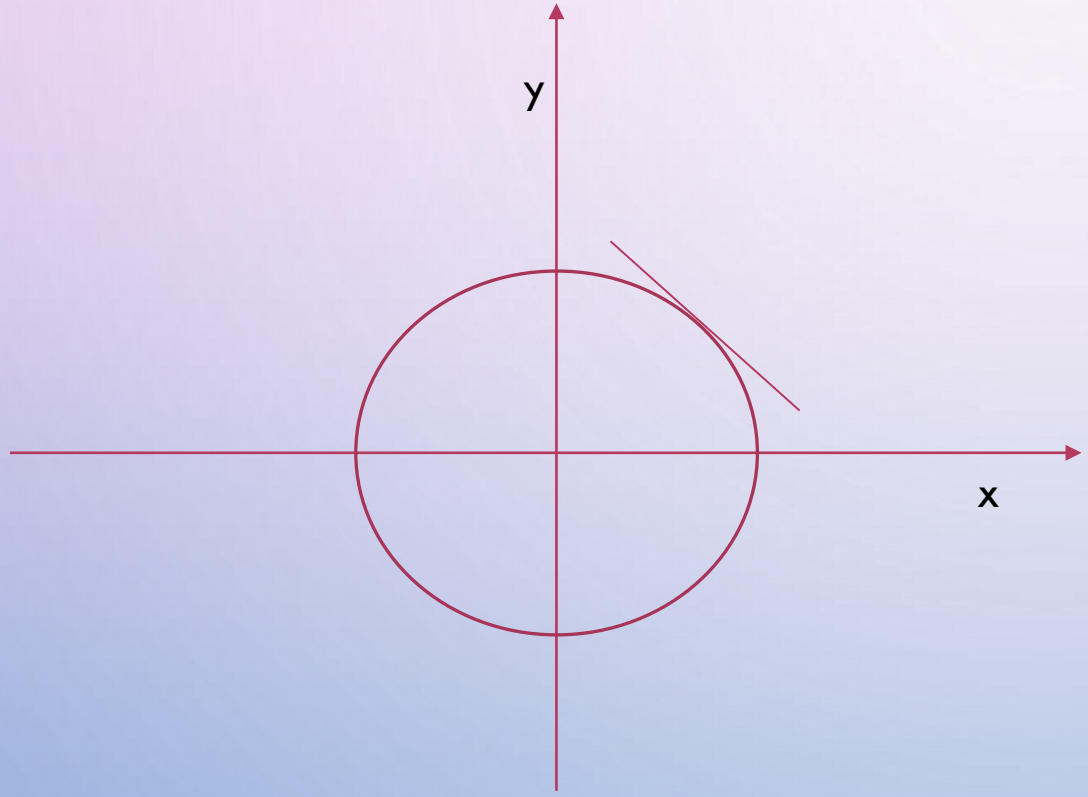
Jetzt überlegt man sich, dass entlang der Kreislinie, wenn ich also x und y variiere, die ganze Zeit f(x,y) sich nicht ändert. Das folgende totale Differential:

$$df = f_x\, dx + f_y\, dy$$

ist also Null (f ändert sich nicht, df=0) entlang der Kreislinie. Aus $0 = f_x\, dx + f_y\, dy$ erhält man durch Termumformungen:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{f_x}{f_y}.$$

IMPLIZITES ABLEITEN



Da steht also, wie man bei gegebenem f die Ableitung von y(x) nach x ausrechnet.

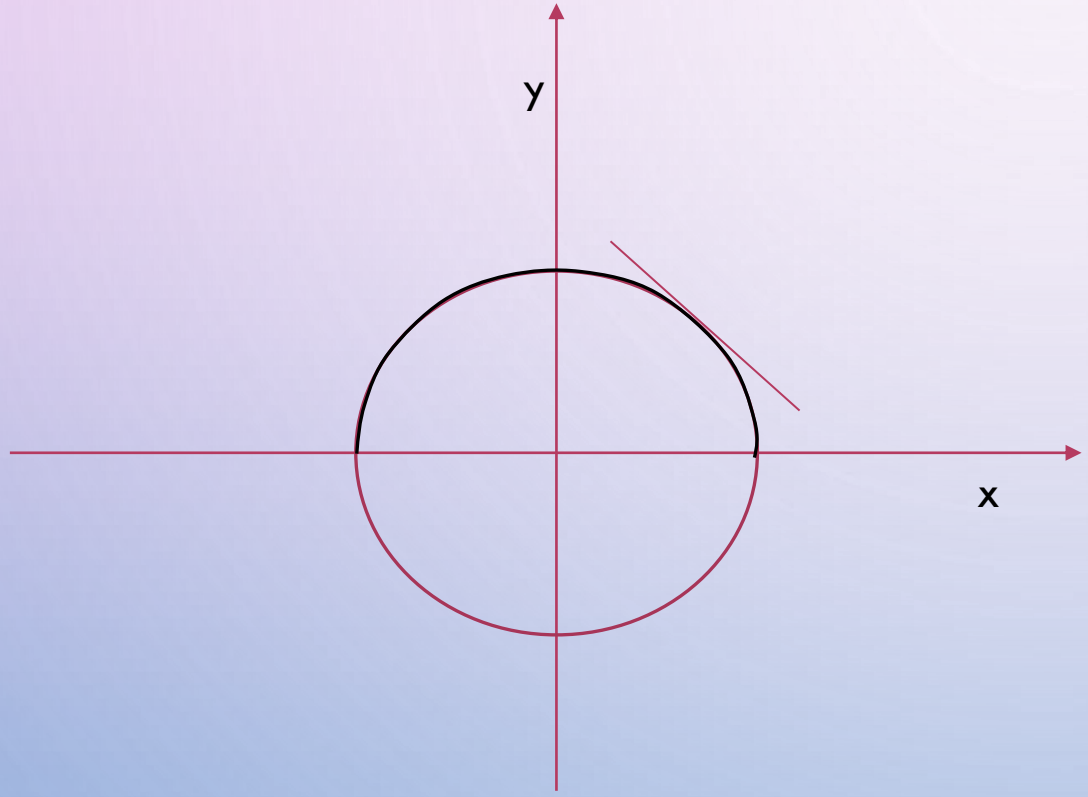
$$\frac{dy}{dx} = -\frac{f_x}{f_y}.$$

Im Beispiel mit dem Kreis:

$$\frac{dy}{dx} = -\frac{\frac{\partial}{\partial x}(x^2+y^2)}{\frac{\partial}{\partial y}(x^2+y^2)} = -\frac{2x}{2y} = -\frac{x}{y}$$

Und siehe da… die Ableitung ist auch nur implizit gegeben. Es tauchen wieder x UND y im Term auf.

IMPLIZITES ABLEITEN



$$\frac{dy}{dx} = -\frac{f_x}{f_y} = -\frac{x}{y}$$

Diese Ableitung macht nur dann Sinn, wenn f_y nicht 0 ist… also für ein Teilstück der Kurve zwischen zwei Punkten, an denen die Tangente parallel zur y-Achse verläuft… genau das Teilstück, das man als Funktion y(x) auffassen kann. Interessant, oder?

Das ist der sogenannte Satz über die implizite Funktion. In zwei Wochen kommen wir darauf zurück.

FÜR DIE ÜBUNGSAUFGABEN

Wenn also die Aufgabe lautet, für eine implizite Funktion f(x,y)=0 die Ableitung $\frac{dy}{dx}$ zu rechnen z.B. für

$$f(x,y) = x^2 + y^2 - r^2,$$

dann leiten Sie f partiell nach x und partiell nach y ab und setzen $\frac{dy}{dx} = -\frac{f_x}{f_y}$. Fertig.

Und das gilt übrigens auch für Aufgabe 3!