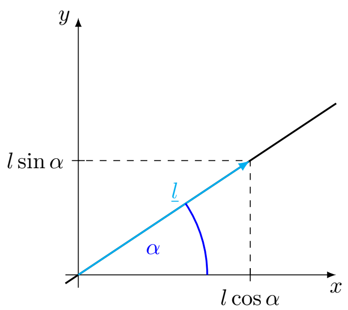
Kémiai matematika

Busai Ágota
agota.busai@gmail.com
www.math.bme.hu/~bgotti

2016.10.04.

2016.09.22. **20.** Add meg az $f(x,y)=x^3+y$ függvény deriváltját az l egyenes irányában, ha az l egyenes az x tengellyel α szöget zár be!

Megoldás:



$$f(l)=f(x(l),y(l))$$

$$\underset{\substack{\uparrow\\ \text{totális derivált}}}{\frac{\mathrm{d}f(l)}{\mathrm{d}l}}=\frac{\partial f}{\partial x}\frac{\mathrm{d}x(l)}{\mathrm{d}l}+\frac{\partial f}{\partial y}\frac{\mathrm{d}y(l)}{\mathrm{d}l}=\left\langle\underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial x},\frac{\partial f}{\partial y}\right)}_{\nabla f}\middle|\left(\frac{\mathrm{d}x(l)}{\mathrm{d}l},\frac{\mathrm{d}y(l)}{\mathrm{d}l}\right)\right\rangle$$

Mik az $x(l)$ és $y(l)$ függvények?

$$\left.\begin{aligned}x(l)&=l\cos\alpha\\ y(l)&=l\sin\alpha\end{aligned}\right\}\rightsquigarrow\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}l}=\cos\alpha,\quad\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}l}=\sin\alpha$$

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}l}=\left\langle\nabla f\middle|\underset{\substack{\uparrow\\ l\text{ irányú egységvektor}=\underline{e}_l}}{\begin{pmatrix}\cos\alpha\\ \sin\alpha\end{pmatrix}}\right\rangle=\langle\nabla f|\underline{e}_l\rangle$$

Tehát $\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}l}=3x^2\cos\alpha+\sin\alpha.$

Definíció (Iránymenti derivált): Az $f(x,y,z)$ függvény *iránymenti derivált*ja az $\underline{u}$ vektor irányában:

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{u}}=\left\langle\operatorname{grad}f\middle|\frac{\underline{u}}{|\underline{u}|}\right\rangle=\left\langle\nabla f\middle|\underbrace{\frac{\underline{u}}{|\underline{u}|}}_{\underline{e}_u}\right\rangle=\nabla f\cdot\underline{e}_u.$$

Megjegyzés (Jelölés):

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{u}}=\nabla_{\underline{u}}f=\operatorname{grad}_{\underline{u}}f$$

Megjegyzés: Az iránymenti derivált a gradiens irányában maximális, ugyanis

$$\langle\nabla f|\underline{u}\rangle=|\nabla f|\;|\underline{u}|\;\cos\alpha,$$

ahol ∇f és $\underline{u}$ közbezárt szöge α. Ez maximális, ha $\cos\alpha=1$, azaz ha $\alpha=0$, tehát ha ∇f és $\underline{u}$ párhuzamosak és azonos irányúak.
Ekkor $f(\underline{x})$ függvény $\underline{u}$ vektor irányában vett iránymenti deriváltjának *maximális értéke* adott $\underline{x}_0$ pontban

$$|\operatorname{grad}f(\underline{x}_0)|=|\nabla f(\underline{x}_0)|\,.$$

Tehát a ∇f vektor irányában elmozdulva nő leggyorsabban a függvényérték.
Hasonlóan, az iránymenti derivált minimális, ha $\cos\alpha=-1$, azaz ha $\alpha=\pi$, tehát ha ∇f és $\underline{u}$ párhuzamosak és ellentétes irányúak. Tehát a $-\nabla f$ vektor irányában elmozdulva csökken leggyorsabban a függvényérték.

2016.09.22. **21.** Legyen $f(x,y,z)=x^4+y^4+z^4+1$, $P_0(1,-1,0)$.

(a) $\operatorname{grad}f=?$

(b) $\operatorname{grad}f|_{P_0}=?$

(c) Határozd meg $\left.\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{e}}\right|_{P_0}$-t, ha $\underline{e}\|\underline{v}=(2,1,3)$

(d) Add meg $\max\limits_{\underline{e}} \left.\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{e}}\right|_{P_0}$ értékét és irányát!

Megoldás: (a)

$$\begin{aligned} f'_x &= 4x^3 \\ f'_y &= 4y^3 \\ f'_z &= 4z^3 \\ \operatorname{grad} f = \nabla f &= \left(4x^3, 4y^3, 4z^3\right) \end{aligned}$$

(b)

$$\operatorname{grad} f|_{P_0} = \nabla f|_{P_0} = \left(f'_x(P_0), f'_y(P_0), f'_z(P_0)\right) = (4, -4, 0)$$

(c)

$$\left.\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{e}}\right|_{P_0} = \left\langle \nabla f|_{P_0} \middle| \underline{e} \right\rangle = \left\langle (4, -4, 0) \middle| \frac{1}{\sqrt{14}}\,(2, 1, 3) \right\rangle = \frac{4}{\sqrt{14}}$$

$$\underline{e} = \frac{\underline{v}}{\|\underline{v}\|} = \tfrac{1}{\sqrt{14}}\,(2, 1, 3)$$

(d)

értéke: $\max\limits_{\underline{e}} \left.\dfrac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\underline{e}}\right|_{P_0} = \left|\nabla f|_{P_0}\right| = \sqrt{4^2 + (-4)^2 + 0^2} = \sqrt{32}$

iránya: $\underline{e} = \dfrac{\operatorname{grad} f(P_0)}{|\operatorname{grad} f(P_0)|} = \dfrac{1}{\sqrt{32}}\,(4, -4, 0)$