

Derivadas parciais e gradiente

Uma força conservativa em 3D é descrita por uma energia potencial $U(\mathbf{r})$ ou $U(x, y, z)$. Ou seja, por uma função que depende das 3 coordenadas, tal que

$$\int_C \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = U(x_A, y_A, z_A) - U(x_B, y_B, z_B) \quad (1)$$

que vale p/ qualquer caminho C que começa em A e termina em B .

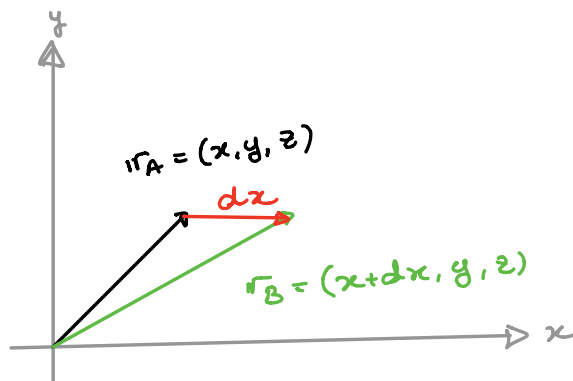
Mas como fazemos para extrair a força \mathbf{F} a partir de $U(\mathbf{r})$?

Note que U é um escalar ao passo que \mathbf{F} é um vetor. Precisamos portanto, de uma operação que produza um vetor a partir de um escalar.

Considere a Eq. (1) para um caminho puramente na direção x :

$$d\mathbf{r} = dx \hat{i} \quad (2)$$

Além disso, suponha que \mathbf{r}_A e \mathbf{r}_B estão muito próximos um do outro:



$$\mathbf{r}_A = (x, y, z) \quad (3)$$

$$\mathbf{r}_B = (x+dx, y, z)$$

Como r_A e r_B estão muito próximos o lado esquerdo da Eq. (1) pode ser aproximado por

$$\int_C^B \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \int_A^B F_x dx \approx F_x(x, y, z) dx \quad (4)$$

onde $F_x(x, y, z)$ é a componente x de \mathbf{F} , que pode depender de x, y e z .

Já o lado direito da (1) se torna, devido à (3),

$$U(x_A, y_A, z_A) - U(x_B, y_B, z_B) = U(x, y, z) - U(x+dx, y, z) \quad (5)$$

Combinando (4) e (5) chegamos portanto a

$$F_x dx = U(x, y, z) - U(x+dx, y, z)$$

$$\text{ou} \quad F_x = - \left[\frac{U(x+dx, y, z) - U(x, y, z)}{dx} \right] \quad (6)$$

Você pode reparar agora que isso tem a cara de uma derivada em x . Isso é o que chamamos de *derivada parcial*. Derivamos com relação a x , mantendo y e z constantes.

ou seja, tomando o limite $dx \rightarrow 0$ obtemos

$$F_x = - \frac{\partial U}{\partial x} \quad (7)$$

O símbolo " ∂ ", que lê-se "del" serve apenas para enfatizar que a derivada em questão é parcial. Ou seja, mantendo y e z fixos.

A Eq. (7) mostra, portanto, que a componente x é obtida derivando U em relação a x . claro, a conta para as componentes y e z serão idênticas. Ou seja, temos

$$F_x = - \frac{\partial U}{\partial x} \quad F_y = - \frac{\partial U}{\partial y} \quad F_z = - \frac{\partial U}{\partial z} \quad (8)$$

Essa Eq. mostra que no caso de forças conservativas, as 3 funções $F_x(r)$, $F_y(r)$ e $F_z(r)$ na verdade vem todas de uma única função $U(r)$.

Ex:

Para praticar com derivadas parciais, considere o seguinte exemplo:

$$U(x, y, z) = \lambda x^2 y z + \gamma x z$$

Para derivar em relação a x , mantemos todo o resto constante.

Por exemplo

$$\frac{\partial}{\partial x} (\lambda x^2 y z) = \lambda y z \underbrace{\frac{\partial}{\partial x} (x^2)}_{2x} = 2 \lambda x y z$$

Com isto obtemos

$$\frac{\partial U}{\partial x} = 2\lambda xy z + \lambda z$$

Da mesma forma

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \lambda x^2 z$$

$$\frac{\partial U}{\partial z} = \lambda x^2 y + \lambda x$$

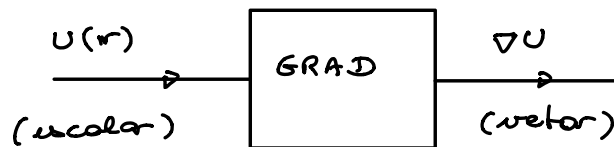
Combinando as 3 componentes de (8) podemos escrever o vetor \mathbf{F} como

$$\mathbf{F} = - \frac{\partial U}{\partial x} \hat{i} - \frac{\partial U}{\partial y} \hat{j} - \frac{\partial U}{\partial z} \hat{k} \quad (9)$$

Esse tipo de estrutura é muito comum. Por isso definiremos o **gradiente de $U(\mathbf{r})$** como

$$\nabla U = \frac{\partial U}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial U}{\partial z} \hat{k} \quad (10)$$

O gradiente transforma a função $U(\mathbf{r})$, que é um escalar, num vetor



Com isso a força (9) fica finalmente escrita como

$$\mathbf{F} = -\nabla U \quad (11)$$

#elegância.

—''—

Ex: íons aprisionados

Hoje em dia conseguimos produzir armadilhas que aprisionam um único átomo. Isso mesmo: um único fucking átomo!

Isso é feito ionizando o átomo (arrancando um elétron, pra que ele fique carregado) e aplicando uma combinação de campos elétricos e magnéticos. A armadilha mais popular é a chamada armadilha de quadrupolo. Ela produz um potencial que tem a seguinte forma

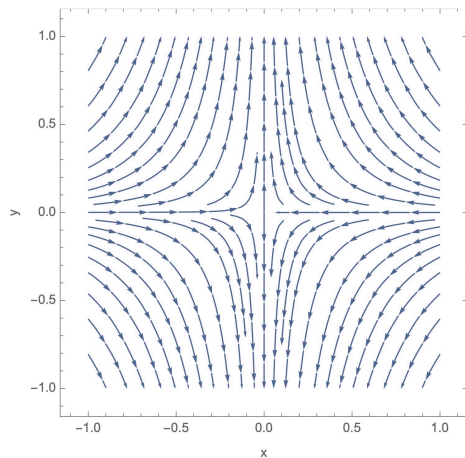
$$U = \frac{A}{2} (x^2 + y^2 - 2z^2) \quad (12)$$

onde A é uma constante.

A força produzida por essa energia potencial é calculada a partir da (9):

$$\mathbf{F} = A \left(-x \hat{i} - y \hat{j} + 2z \hat{k} \right) \quad (13)$$

Como você pode ver, essa força tem a seguinte curva:

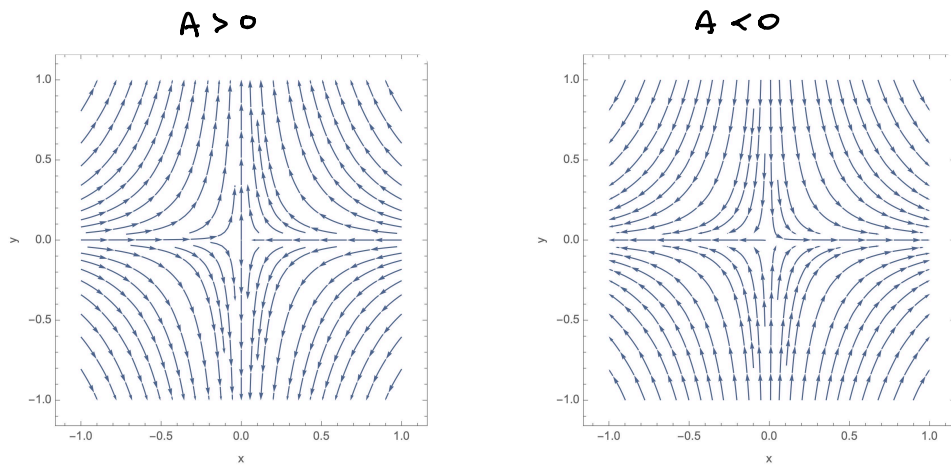


No eixo x , essa armadilha parece meio ruim. Nas direções x e y temos uma força restauradora, como a do oscilador harmônico. No eixo z , uma força que tende a trazer a partícula ao centro. Na direção z , no entanto, o efeito da força é contrário: ele expelle a partícula.

Esse é um problema de usar campos eletromagnéticos. Não é possível fazer uma configuração de campos tal que a força sempre aponte para dentro (que é o que gostaríamos de uma armadilha).

Para resolver esse problema o que se faz é tornar a constante A dependente do tempo, de tal forma que ela oscile entre valores positivos e negativos. Por exemplo $A(t) = A_0 \cos(\omega t)$. Isso é feito usando correntes alternadas.

Se A é negativo o diagrama de forças se inverte



Agora a força é restauradora em z mas não em x, y .
 Se fizermos $A(t)$ oscilar, ficamos alternando entre esses dois compartimentos. Escolhendo a frequência de oscilação de forma apropriada torna-se possível manter o íon aprisionado.

Outro trick para saber se uma força é conservativa

Derivadas parciais satisfazem uma propriedade muito importante: a ordem com que derivamos não importa

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = \frac{\partial^2 U}{\partial y \partial x} \quad (14)$$

ou seja

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right)$$

vejamos um exemplo:

$$U = x^2 y^3 + 2x$$

Nesse caso

$$\frac{\partial U}{\partial x} = 2xy^3 + 2$$

$$\frac{\partial U}{\partial y} = 3x^2 y^2$$

Agora derivamos $\partial U / \partial x$ com relação a y :

$$\frac{\partial^2 U}{\partial y \partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial U}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial y} (2xy^3 + 2) = 6xy^2$$

Por outro lado

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial U}{\partial y} \right) = \frac{\partial}{\partial x} (3x^2 y^2) = 6xy^2$$

Da no mesmo! ;)

Essa propriedade segue diretamente da definição de derivada parcial, Eq. (6). Eu vou deixar como exercício para você checar que isto de fato é verdade.

A Eq. (14) fornece um teste super útil para saber se uma força é conservativa ou não. Basta testar se

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} \stackrel{?}{=} \frac{\partial F_y}{\partial x} \quad (15a)$$

$$\frac{\partial F_x}{\partial z} \stackrel{?}{=} \frac{\partial F_z}{\partial x} \quad (15b)$$

$$\frac{\partial F_y}{\partial z} \stackrel{?}{=} \frac{\partial F_z}{\partial y} \quad (15c)$$

Se for verdade
então

if é conservativa

Por que isso dá certo? veja só: se \mathbf{F} é conservativa então ela tem que vir de uma energia potencial $U(\mathbf{r})$. Ou seja

$$F_x = -\frac{\partial U}{\partial x} \quad F_y = -\frac{\partial U}{\partial y} \quad F_z = -\frac{\partial U}{\partial z}$$

Da (45a), por exemplo, obtemos então que

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = - \frac{\partial^2 U}{\partial y \partial x}$$

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} = - \frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}$$

que devem ser iguais por causa da (14).

Por outro lado, quando \vec{F} não é conservativa significa que não é possível definir uma $U(r)$ que forneça \vec{F} e, conseqüentemente, a (15) não vai ser verdadeira.

Ex: $\vec{F} = \alpha x \hat{j}$ [Exemplo usado na aula passada].

$$F_x = 0, \quad F_y = \alpha x$$

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = 0$$

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} = \alpha$$

Não são iguais.

A força não é conservativa.

Ex: força gravitacional $F = - \frac{GMm}{r^2} \hat{r}$ (16)

É mais conveniente escrever $\hat{r} = \mathbf{r}/r$ e portanto

$$F = - \frac{GMm}{r^3} \mathbf{r} \quad (16')$$

A componente x será, por exemplo,

$$F_x = - \frac{GMmx}{r^3} = - \frac{GMm x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} \quad (17)$$

Vamos testar, por exemplo, a Eq. (15a). Para começar, precisamos derivar F_x com relação a y . Podemos usar a regra da cadeia

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial F_x}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} \quad (18)$$

(Ela permanece válida para derivadas parciais). Temos então

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_x}{\partial r} &= -GMmx \frac{\partial}{\partial r} (r^{-3}) \\ &= -GMmx \left(-\frac{3}{r^4} \right) \\ &= \frac{3GMmx}{r^4} \end{aligned} \quad (19)$$

Além disso

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Aqui usamos a regra da cadeia novamente. Definimos a variável temporária $A = x^2 + y^2 + z^2$, de tal forma que

$$\frac{\partial r}{\partial y} = \frac{\partial \sqrt{A(y)}}{\partial y} = \frac{\partial \sqrt{A}}{\partial A} \frac{\partial A}{\partial y}$$

As duas derivadas restantes, agora sabemos fazer:

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial y} &= \left(-\frac{1}{2} A^{-1/2} \right) (2y) \\ &= \frac{-y}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \end{aligned}$$

Portanto

$$\frac{\partial r}{\partial y} = -\frac{y}{r} \quad (20)$$

Substituindo (19) e (20) em (18) obtemos

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{3GMmx}{r^4} \left(-\frac{y}{r} \right) \quad (21)$$

Para saber se F é conservativa, precisamos agora comparar isso com $\frac{\partial F_y}{\partial x}$. Assim como em (18), escrevemos

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} = \frac{\partial F_y}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} \quad (22)$$

Neste ponto não precisamos fazer mais nenhuma conta.

Podemos explorar a **simetria** do problema. Olha só: a variável r trata x e y em pé de igualdade. Portanto, da Eq. (20)

$$\text{se } \frac{\partial r}{\partial y} = -\frac{y}{r} \quad \xrightarrow{\text{simetria}} \quad \frac{\partial r}{\partial x} = -\frac{x}{r} \quad (23)$$

Tem que ser assim. A conta é simétrica!

O mesmo vale para a Eq. (19):

$$\frac{\partial F_x}{\partial r} = \frac{3GMm x}{r^4} \quad \xrightarrow{\text{simetria}} \quad \frac{\partial F_y}{\partial r} = \frac{3GMm y}{r^4} \quad (24)$$

com isto a (22) se torna

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} = \frac{3GMm y}{r^4} \left(-\frac{x}{r} \right) \quad (25)$$

Comparando (21) e (25) vemos que

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial F_y}{\partial x}$$

Para concluir que a força é conservativa, precisamos também checar (15b) e (15c). Mas, de novo, por simetria, se (15a) é válida então (15b) e (15c) também tem de ser.

Ex: $\mathbf{F} = \frac{A}{r} (-x\hat{i} - y\hat{j} + 3\hat{k})$

Eu vou deixar esse exemplo como exercício. Apenas gostaria de fazer 2 comentários. Primeiro, simetria: note como essa força é simétrica em relação a x e y , mas não em relação a z . Então, por exemplo, se sabemos $\frac{\partial F_x}{\partial y}$ podemos obter $\frac{\partial F_y}{\partial x}$ trocando $x \leftrightarrow y$. O mesmo vale para

$\frac{\partial F_x}{\partial z}$ e $\frac{\partial F_y}{\partial z}$. Mas, por exemplo, não dá para saber $\frac{\partial F_z}{\partial x}$ a

partir de $\frac{\partial F_x}{\partial z}$.

O meu segundo comentário é que uma força não é conservativa. Mas para ver isso tem que fazer os 3 testes (15a), (15b) e (15c). Só o (15a) não é suficiente. De fato, você vai obter que

$$\frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial F_y}{\partial x}$$

mas

$$\frac{\partial F_x}{\partial z} \neq \frac{\partial F_z}{\partial x}$$

$$\frac{\partial F_y}{\partial z} \neq \frac{\partial F_z}{\partial y}$$

Ou seja, uma força só é conservativa quando os 3 testes da Eq. (15) são satisfeitos.

Superfícies equipotenciais

Voltemos lá para o começo. A derivada parcial de U com relação a x é

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \frac{U(x+dx, y, z) - U(x, y, z)}{dx} \quad (26)$$

para um dx muito pequeno. As derivadas $\partial U/\partial y$ e $\partial U/\partial z$ são definidas da mesma maneira. Isso podemos então escrever

$$U(x+dx, y, z) - U(x, y, z) = \frac{\partial U}{\partial x} dx \quad (27)$$

Isso fornece o quanto U muda ao andarmos de $r = (x, y, z)$ até $(x+dx, y, z)$. O resultado é a derivada parcial naquela direção vezes a magnitude de do quanto andamos.

E se agora queremos calcular o quanto U muda ao andarmos em uma direção arbitrária, que não x, y ou z ? Considere, por exemplo, uma certa direção

$$ds = ds_x \hat{i} + ds_y \hat{j} + ds_z \hat{k} \quad (28)$$

Queremos calcular

$$dU := U(r+ds) - U(r) \quad (29)$$

Ou seja, o quanto a energia potencial muda ao irmos de r para $r+ds$. Para calcular U , tomamos zero

$$\begin{aligned}dU &= U(x+ds_x, y+ds_y, z+ds_z) - U(x, y, z) \\&= U(x+ds_x, y+ds_y, z+ds_z) - U(x+ds_x, y+ds_y, z) \\&\quad + U(x+ds_x, y+ds_y, z) - U(x+ds_x, y, z) \quad (30) \\&\quad + U(x+ds_x, y, z) - U(x, y, z)\end{aligned}$$

Os dois termos em azul são iguais mas com sinais opostos. Eles portanto se cancelam. O mesmo vale para os termos em vermelho. Ou seja, tomamos zero.

O motivo pela qual eu fiz isto é porque agora podemos associar cada linha a uma derivada parcial usando a (27).

Por exemplo

$$\begin{aligned}3^{\text{a}} \text{ linha de (30)} &= U(x+ds_x, y, z) - U(x, y, z) \\&= \frac{\partial U(r)}{\partial x} ds_x\end{aligned} \quad (31)$$

No caso da 2^a linha de pare fazer algo semelhante. Note como na 2^a linha x está fixo em $x+ds_x$. Se estamos mudando a componente y . Ou seja

$$\begin{aligned}
 2^{\text{a}} \text{ linha de (30)} &= U(x+ds_x, y+ds_y, z) - U(x+ds_x, y, z) \\
 &= \frac{\partial U(x+ds_x, y, z)}{\partial y} ds_y \quad (32)
 \end{aligned}$$

Ao contrário da (31), a derivada aqui é avaliada em $(x+ds_x, y, z)$ ao invés de (x, y, z) . Mas na verdade isso não importa: os dois pontos são tão próximos que podemos aproximar

$$\frac{\partial U(x+ds_x, y, z)}{\partial y} \approx \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial y}$$

Com isso a 2ª linha se torna

$$2^{\text{a}} \text{ linha de (30)} = \frac{\partial U(r)}{\partial y} ds_y \quad (33)$$

Você já está vendo onde vamos chegar. Na 1ª linha temos

$$1^{\text{a}} \text{ linha de (30)} = \frac{\partial U(r)}{\partial z} ds_z \quad (34)$$

Portanto, somando tudo obtemos

$$du = U(r+ds) - U(r) = \frac{\partial U}{\partial x} ds_x + \frac{\partial U}{\partial y} ds_y + \frac{\partial U}{\partial z} ds_z \quad (35)$$

A lógica é a mesma da (27). Apenas tomamos a contribuição de cada direção.

Usando a noção de gradiente na Eq. (10) podemos escrever este resultado de forma mais elegante:

$$U(\mathbf{r} + d\mathbf{s}) - U(\mathbf{r}) = \left[\frac{\partial U}{\partial x} \hat{i} + \frac{\partial U}{\partial y} \hat{j} + \frac{\partial U}{\partial z} \hat{k} \right] \cdot \left[ds_x \hat{i} + ds_y \hat{j} + ds_z \hat{k} \right]$$

Ou seja

$$dU = \nabla U \cdot d\mathbf{s} = -\mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} \quad (36)$$

Podíamos ter derivado este resultado da definição de trabalho infinitesimal, $dW = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} = U(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} + d\mathbf{s})$. Mas eu achei que seria legal derivá-lo aqui de forma mais autossuficiente, usando apenas derivadas parciais.

A Eq. (36) é super bacana. Ela fornece uma forma de saber como a energia potencial varia quando andamos numa direção arbitrária do espaço. Vamos que isto está relacionado com o gradiente de U e, portanto, com a força $\mathbf{F} = -\nabla U$.

A ideia é mais ou menos a seguinte. Suponha que você está imerso num campo de força descrito por $U(\mathbf{r})$. Ai você quer saber: se eu dou um passo numa direção qualquer $d\mathbf{s}$, quanto que muda a minha energia? A Eq. (36) diz que essa mudança depende do produto escalar entre \mathbf{F} e $d\mathbf{s}$.

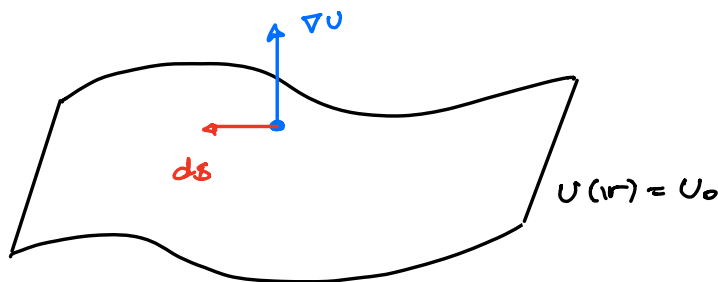
Particularmente interessantes são aquelas direções onde a energia não muda. Ou seja, $U(\mathbf{r} + d\mathbf{s}) = U(\mathbf{r})$. Isso ocorre quando \mathbf{F} é perpendicular a $d\mathbf{s}$, pois nesse caso o produto escalar é zero. No caso da força peso, por exemplo, $\mathbf{F} = -mg\hat{k}$ e portanto deslocamentos ao longo de \hat{i} ou \hat{j} não mudam a energia potencial.

Isso introduz a ideia de **superfície equipotencial**. Ou seja, superfícies no espaço onde a energia é constante

$$U(x, y, z) = U_0 = \text{constante} \quad (37)$$

No caso da força peso, por exemplo, as superfícies equipotenciais são planas com altura z constante.

Da (36) vemos que $U(\mathbf{r} + d\mathbf{s}) = U(\mathbf{r})$ sempre que $d\mathbf{s}$ for perpendicular a ∇U (ou \mathbf{F} , mesma coisa). Portanto, ∇U será sempre perpendicular à uma superfície equipotencial



Concluímos portanto que

" ∇U ou \mathbf{F} é sempre *normal* à superfície equipotencial." (38)

A palavra normal significa o mesmo que perpendicular.

Outra coisa que podemos concluir da Eq (36) é qual a direção de maior *acive*. Ou seja, em qual direção U muda mais significativamente? A resposta é quando dS é paralelo a ∇U . Portanto

" ∇U estabelece a direção de máximo *acive* de U " (39)

A Eq. (36) é também menos o trabalho realizado em irmos de r até $r + dS$:

$$dW = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{S} = U(r) - U(r + dS) \quad (40)$$

veamos, portanto, outra interpretação para as superfícies equipotenciais: *deslocamentos ao longo de equipotenciais não realizam trabalho.*

Por último, discutimos a ideia de **derivada direcional**. Da

(36) temos

$$dU = \nabla U \cdot d\mathbf{s} \quad (41)$$

Vamos agora escrever

$$d\mathbf{s} = ds \hat{\mathbf{s}} \quad (42)$$

onde $\hat{\mathbf{s}}$ é um vetor especificando a direção de $d\mathbf{s}$, ao passo que ds é a magnitude. Com isto a (41) se torna

$$dU = (\nabla U \cdot \hat{\mathbf{s}}) ds \quad (43)$$

onde eu coloquei entre parênteses a parte vetorial, que entra de fato no produto escalar. Definimos agora a derivada direcional como

$$\frac{\partial U}{\partial s} = \nabla U \cdot \hat{\mathbf{s}} \quad (44)$$

Isso representa a derivada de U ao longo de uma direção $\hat{\mathbf{s}}$. A variação total de U será, então

$$dU = \frac{\partial U}{\partial s} ds \quad (45)$$

Forças centrais

Uma força \vec{F} é chamada de central quando ela pode ser escrita como

$$\vec{F} = F(r) \hat{r} \quad (46)$$

Ou seja, quando ela tem a direção do vetor posição \hat{r} e a magnitude/sentido dependendo apenas da distância $F(r)$.

O principal exemplo é a força gravitacional

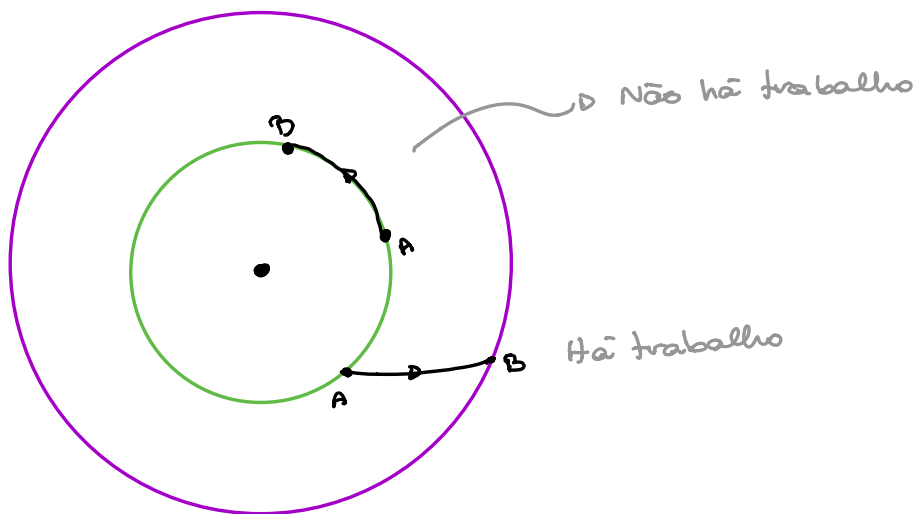
$$\vec{F} = -\frac{GMm}{r^2} \hat{r} \quad \text{ou} \quad F(r) = -\frac{GMm}{r^2} \quad (47)$$

A energia potencial neste caso é dada por

$$U(r) = -\frac{GMm}{r} \quad (48)$$

Eu deixo como exercício para vocês checarem que de fato $\vec{F} = -\nabla U$.

Como \vec{F} aponta na direção \hat{r} , as superfícies equipotenciais serão sempre tangenciais (ou seja, na direção de $\hat{\theta}$). Portanto, a força gravitacional não realiza trabalho quando nos movemos ao longo da mesma órbita



Finalmente, podemos aplicar o conceito de derivada direcional para calcular $\int \mathbf{F}$ a partir de U . Sabemos que

$$dU = \nabla U \cdot d\mathbf{s} = -\mathbf{F} \cdot d\mathbf{s} \quad (49)$$

Além disso, sabemos que

$$dU = \frac{\partial U}{\partial s} ds \quad (50)$$

Escolhemos agora $d\mathbf{s} = dr \hat{\mathbf{r}}$ (ou seja, um deslocamento na direção $\hat{\mathbf{r}}$). Como $\mathbf{F} = F(r) \hat{\mathbf{r}}$ obtemos da (49):

$$dU = -F(r) dr$$

Comparando com a (50), vemos então que

$$F(r) = -\frac{\partial U}{\partial r} \quad (51)$$

Isso fornece uma forma muito mais simples de calcular F a partir de U no caso de forças centrais. Por exemplo, quando

$$U(r) = - \frac{GMm}{r}$$

obtemos

$$\begin{aligned} F(r) &= (-1)(-1)(-1) \frac{GMm}{r^2} \\ &= - \frac{GMm}{r^2} \end{aligned}$$

como esperado.