Anhang D

Legendre-Transformation

D.1 Legendre-Transformation einer Funktion einer Variablen

Sei f eine strikt konvexe reelle Funktion einer reellen Variablen x auf einem Definitionsintervall $\mathcal{I}$, d.h. für alle $x_1, x_2 \in \mathcal{I}$ mit $x_1 \neq x_2$ und $\lambda \in]0,1[$ gilt

$$f\big(\lambda x_1 + (1-\lambda)x_2\big) < \lambda f(x_1) + (1-\lambda)f(x_2). \tag{D.1}$$

Die Ungleichung (D.1) bedeutet, dass der Graph der Funktion unterhalb der Verbindungsstrecke zweier seiner Punkten liegt, wie in Abb. D.1 illustriert wird.

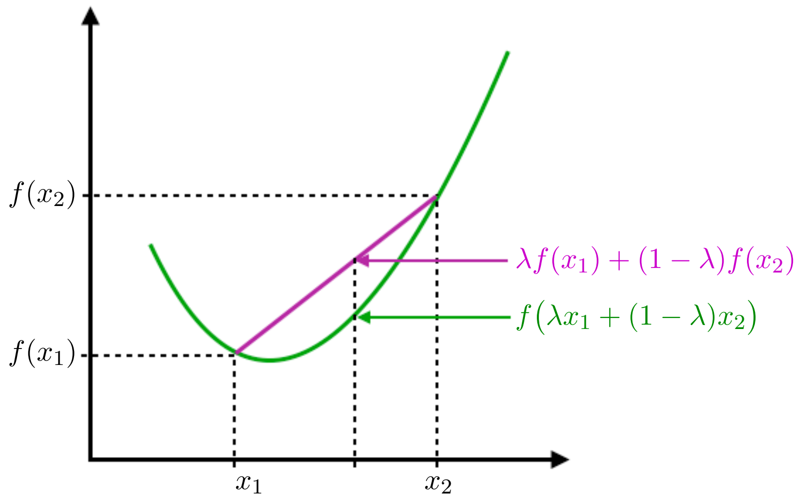

Abbildung D.1 – Beispiel einer strikt konvexen reellen Funktion.

Sei zudem angenommen, dass f zweimal stetig differenzierbar ist. Dann ist die erste Ableitung f' streng monoton wachsend auf $\mathcal{I}$ und demzufolge die zweite Ableitung $f''(x)$ positiv für alle $x \in \mathcal{I}$. Die Funktion y auf $\mathcal{I}$ definiert durch $y(x) \equiv f'(x)$ für alle $x \in \mathcal{I}$ ist eine bijektive Abbildung von $\mathcal{I}$ nach ihrer Wertemenge $\mathcal{J}$; daher ist sie invertierbar. Hiernach wird die Umkehrfunktion als $x(y)$ bezeichnet.

Die *Legendre-Transformierte* der Funktion f ist eine Funktion g auf $\mathcal{J}$, die für alle $y \in \mathcal{J}$ durch

$$g(y) \equiv yx(y) - f\big(x(y)\big) \tag{D.2}$$

definiert ist.

Da die Ableitung von g nach der Variablen y gleich $x(y)$ ist, findet man, dass eine zweite Legendre-Transformation von g genau f gibt. Das heißt, die Legendre-Rücktransformation nimmt die gleiche Form wie die direkte Transformation an.

Sei $h(z) \equiv zy(z) - g\big(y(z)\big)$ mit $z(y) \equiv g'(y)$. Die Anwendung der Kettenregel auf Gl. (D.2) gibt

$$g'(y) = x(y) + yx'(y) - f'\big(x(y)\big)\, x'(y) = x(y),$$

d.h. $z(y) = x(y)$. Daher gilt $h(x) = xy(x) - g\big(y(x)\big) = f(x)$, wobei Gl. (D.2) benutzt wurde. $\square$

Zudem gelten Beziehungen zwischen den Ableitungen von f und g nach ihrer jeweiligen Variablen ab der zweiten Ordnung, insbesondere

$$f''(x)\, g''\big(y(x)\big) = f''\big(x(y)\big)\, g''(y) = 1. \tag{D.3}$$

D.2 Legendre-Transformation einer Funktion mehrerer Variablen

Sei jetzt eine zweimal kontinuierlich differenzierbare Funktion $f(x_1,\dots,x_n,t_1,\dots,t_p)$ von $n+p$ reellen Variablen, mit

$$\det\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_j\,\partial x_k}\right)_{j,k} \neq 0,$$

wobei $(\ \ )_{j,k}$ die $n\times n$-Matrix mit Elementen $\partial^2 f/\partial x_j\,\partial x_k$ bezeichnet. Für jedes $j=1,\dots,n$ wird eine Funktion y_j durch

$$y_j(\{x_i\},\{t_k\}) \equiv \frac{\partial f}{\partial x_j}(\{x_i\},\{t_k\})$$

definiert. Die Umkehrfunktionen, deren Existenz durch die Forderungen an die Matrix der zweiten Ableitungen von f gewährleistet wird, werden mit $x_i(\{y_j\},\{t_k\})$ bezeichnet.

Die Legendre-Transformierte g von f bezüglich der Variablen $\{x_i\}$ wird durch

$$g(y_1,\dots,y_n,t_1,\dots,t_p) \equiv \sum_{j=1}^{n} y_j x_j(y_1,\dots,y_n,t_1,\dots,t_p) - f(x_1,\dots,x_n,t_1,\dots,t_p) \tag{D.4}$$

definiert. Hier auch ist die Rücktransformation gleich der direkten Transformation, d.h. eine zweite Legendre-Transformation von g gibt genau f wieder.

Man sieht sofort, dass die ersten Ableitungen von f und g nach einer der Variablen $\{t_k\}$ negativ zueinander sind:

$$\frac{\partial g}{\partial t_j}(\{y_i\},\{t_k\}) = -\frac{\partial f}{\partial t_j}(\{x_i\},\{t_k\}). \tag{D.5}$$

Für die zweiten Ableitungen von f und g nach ihren jeweiligen natürlichen Variablen ergeben sich mehrere Beziehungen, wie z.B.

$$\sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 g}{\partial y_i\,\partial y_j}\,\frac{\partial^2 f}{\partial x_j\,\partial x_k} = \delta_{ik} \tag{D.6a}$$

analog zur Gl. (D.3) mit dem Kronecker-Symbol δ_{ik}, sowie

$$\frac{\partial^2 g}{\partial y_i\,\partial t_k} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial^2 g}{\partial y_i\,\partial y_j}\,\frac{\partial^2 f}{\partial x_j\,\partial t_k}, \tag{D.6b}$$

$$\frac{\partial^2 g}{\partial t_i\,\partial t_k} = \frac{\partial^2 f}{\partial t_i\,\partial t_k} + \sum_{j,l=1}^{n} \frac{\partial^2 f}{\partial t_i\,\partial x_j}\,\frac{\partial^2 g}{\partial y_j\,\partial y_l}\,\frac{\partial^2 f}{\partial x_l\,\partial t_k}. \tag{D.6c}$$

Bemerkung: Manchmal, insbesondere in der Thermodynamik und Statistischen Physik, nennt man $-g$ die Legendre-Transformierte von f anstatt g.

Literatur zum Anhang D

- Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics* [1] Kap. 3 § 14.
- Nolting, *Analytische Mechanik* [16] Kap. 2.1.
- Scheck, *Mechanik* [18] Kap. 2.13–2.14.