Üb 2.2 Exkurs über Legendre Transformationen:

Es sei F eine <u>konvexe Funktion</u> (d.h. $-F$ konkav) über einer <u>konvexen</u> Menge $\Gamma \subset \mathbb{R}^N$.

Dann wird die Legendretransformierte $F^* \equiv \mathcal{L}F$ ($F^* : \mathbb{R}^N \longrightarrow \mathbb{R} \cup \{\infty\}$) von F durch

$$F^*(y) := \sup_{X \in \Gamma} \{ X \cdot y - F(X) \} \tag{76}$$

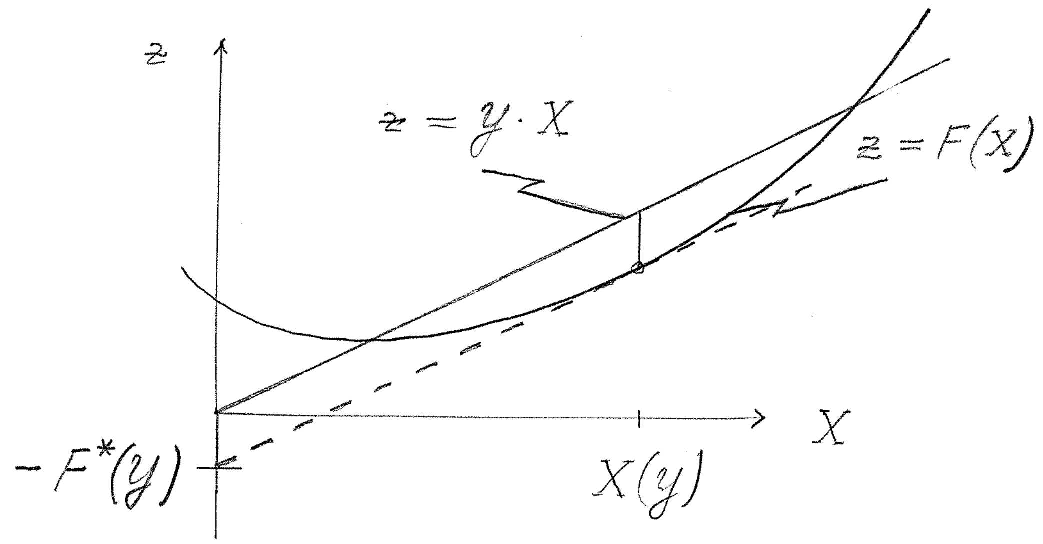
definiert.

Wir zeigen zuerst, dass F^* wieder <u>konvex</u> ist:

$$
\begin{aligned}
F^*(\lambda y_1 + (1-\lambda) y_2) &= \sup_{X \in \Gamma} \{ \lambda y_1 \cdot X + (1-\lambda) y_2 \cdot X - F(X) \} \\
&= \sup_{X} \{ \lambda (y_1 \cdot X - F(X)) + (1-\lambda)(y_2 \cdot X - F(X)) \} \\
&\leq \lambda \sup_{X} (y_1 \cdot X - F(X)) + (1-\lambda) \sup_{X} (y_2 \cdot X - F(X)) \\
&= \lambda F^*(y_1) + (1-\lambda) F^*(y_2).
\end{aligned} \tag{77}
$$

✓

Der Einfachheit halber studieren wir nun zuerst den Fall $N = 1$ (eine einzige Variable). Für ein vorgegebenes y zeichne man die Gerade $z = y \cdot X$ und suche dann den Punkt $X(y)$, in welchem der Graph von F in vertikaler Richtung am weitesten von der Geraden entfernt ist:



$$\Longrightarrow \quad -F^*(y) = F(X(y)) - y \cdot X(y), \quad \text{wo } X(y)$$

dadurch charakterisiert ist, dass $X \cdot y - F(X)$ in $X(y)$ ihr Supremum annimmt. Wenn F strikte konvex und stetig differenzierbar ist, dann ist $X(y)$ Lösung der Gleichung

$$\{X\cdot y - F(X)\}' = 0\,, \text{ d.h. } y = F'(X); \qquad (78)$$

(solange $X(y)$ im Inneren des Intervalls Γ liegt). Wenn F strikte konvex ist, dann ist F' strikte monoton wachsend. In diesem Falle ist die Lösung von (78) eindeutig.

In N Dimensionen wird aus (78)

$$\operatorname{grad}_X \{X\cdot y - F(X)\} = 0, \text{ d.h.}$$

$$y = \operatorname{grad} F(X). \qquad (79)$$

Wenn die Hessische von F, $\left(\dfrac{\partial^2 F}{\partial X^i \partial X^j}\right)$, strikte positiv ist, d.h. F strikte konvex und stetig differenzierbar ist, dann ist die Lösung von (79) eindeutig. Es gilt dann

$$dF^*(y) = d(X(y)\cdot y) - dF(X(y))$$

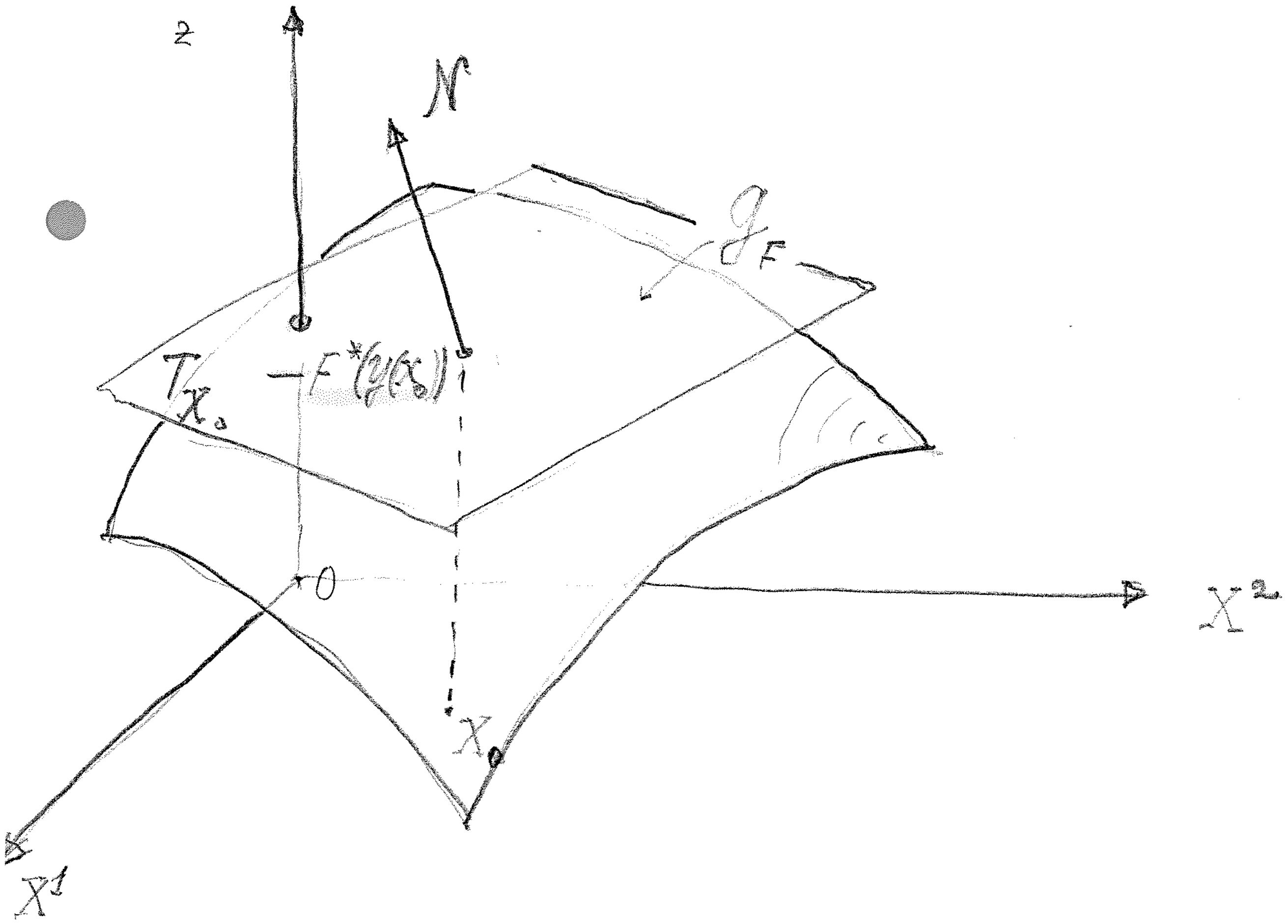
$$= \sum_{j=1}^{N} \Big\{ dX^j \cdot y_j + X^j dy_j - \underbrace{\frac{\partial F}{\partial X^j}}_{y_j \nearrow (79)} dX^j \Big\}$$

Graph: $(X, \; z = F(X))$

Normalenvektor: N

Variation $\left(dX, (\mathrm{grad}\, F)\, dX\right) \perp N$

$\Rightarrow \boxed{N = (\mathrm{grad}\, F, \; -1)}$ has this prop.



$$= \sum_{j=1}^{N} X^j(y)\, dy_j . \tag{80}$$

Daraus folgt, dass

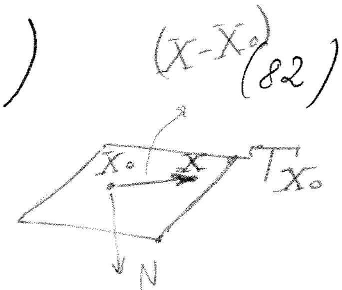
$$\frac{\partial F^*}{\partial y_j}(y) = X^j(y). \tag{81}$$

Nun untersuchen wir den Graphen von F:

$$\mathcal{G}_F := \{(X,z) \mid X \in \Gamma,\ z = F(X)\}$$

Wenn F strikte konvex und stetig differenzierbar ist, so hat $\mathcal{G}_F$ in $X_0 \in \Gamma$ eine <u>Tangentialebene</u>, T_{X_0}, mit dem Normalenvektor

$$\mathcal{N} := (\operatorname{grad} F(X_0), -1) \tag{82}$$



Für $(X,z) \in T_{X_0}$ gilt also

$$(\operatorname{grad} F(X_0), -1)\cdot(X - X_0,\ z - F(X_0)) = 0,$$

also

$$z = X \cdot \operatorname{grad} F(X_0) - \underbrace{\{X_0 \cdot \operatorname{grad} F(X_0) - F(X_0)\}}_{= F^*(y(X_0))} \tag{83}$$

Dies zeigt, dass die Tangentialebene T_{X_0} die

Setze $X = 0$!

z-Achse im Punkt $z = -F^*(Y(X_0))$ schneidet. ⌋ Wenn $\mathcal{G}_F$ lineare ("ebene") Teilstücke enthält, so ist auf einem solchen die Gleichung (79) nicht eindeutig nach X aufzulösen, (d.h. X ist nicht eindeutig durch Y bestimmt). Lineare Teilstücke von $\mathcal{G}_F$ gehen in "Ecken" von $\mathcal{G}_{F^*}$ über; (wie aus (79) und (81) ersichtlich).

C.Q.F.D.

Satz. Wenn F strikte konvex und stetig differenzierbar ist, so ist die Legendretransformation involutiv:

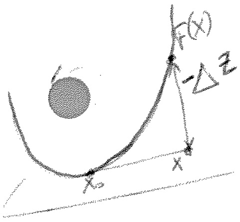
$$(F^*)^* = F \tag{84}$$

Beweis. In (83) wurde gezeigt, dass die Tangentialebene T_{X_0} an $\mathcal{G}_F$ im Punkte X_0 durch die Gleichung

$$z = X \cdot \operatorname{grad} F(X_0) - F^*(y(X_0))$$

$$\overset{(79)}{=} X \cdot y(X_0) - F^*(y(X_0)) \qquad (85)$$

gegeben ist. Da F strikte konvex ist, liegt jede Tangentialebene, T_{X_0}, "unterhalb" G_F, d.h. bei kleineren Werten von z. Also ist



$$\Delta z := X \cdot y(X_0) - F^*(y(X_0)) - F(X) \leq 0,$$

mit "=" wenn $X = X_0$. Halten wir nun X fest, aber variieren y, so wird offenbar das Maximum, $\Delta z = 0$, der Funktion Δz im Punkte $y = y(X)$ angenommen; d.h.

$$F(X) = \sup_y \{X \cdot y - F^*(y)\} \qquad (86)$$

Die rechte Seite von (86) definiert aber gerade $F^{**}(X)$.

Die Legendretransformation für <u>konkave</u> Funktionen kann analog behandelt werden.

Es sei F eine <u>konkave</u> Funktion über einer konvexen Menge $\Gamma \subset \mathbb{R}^N$. Wir definieren $F^* \equiv \mathcal{L}F$ durch

$$F^*(Y) := \inf_{X \in \Gamma} \{X \cdot Y - F(X)\} \qquad (87)$$

Es ist dann F^* wieder <u>konkav</u>. Wenn F stetig differenzierbar und strikte konkav ($\mathrm{Hess}\, F < 0$) ist, dann gilt, dass

$$\underline{(F^*)^* = F.}$$

Die Legendretransformation dient nun dazu, weitere <u>"thermodynamische Potentiale"</u> d. h. Funktionen auf dem Raum der GZ eines TD Systems (nebst S, resp. U) einzuführen, die in den Anwendungen nützlich sein werden.