Die Legendre-Transformation als geometrisches Mittel der Variablentransformation in der Physik

Alexander Leifhelm

12. Oktober 2015

Inhaltsverzeichnis

Vorbemerkungen

Der Text wurde erstellt als freiwillige Zusatzleistung zur Vorlesung "Physik 2" im Sommersemester 2015 an der Westfälischen Wilhelms-Universität Münster unter der Betreuung von Prof. Dr. U. Thiele.
Er ist in Anlehnung an die geometrische Betrachtung der Legendre-Transformation in Ref. [15] v.a. für Funktionen mit einer Veränderlichen entstanden. Die Nutzung von Ebenengleichungen wird in Ref. [3] beschrieben und beeinflusste die hier erfolgte Darstellung. Insbesondere die Herleitung der Legendre-Transformation in höheren Dimensionen orientiert sich an Ref. [14], wurde jedoch zum besseren Verständnis weiter ausgeführt.
Die Auswahl der unterschiedlichen thermodynamischen Potentiale sowie ihr tabellarischer Vergleich wurden durch Ref. [12] inspiriert. Auf detaillierte Verweise im Text wurde im Wesentlichen verzichtet.

Anzumerken ist, dass keine der im Rahmen der Recherche genutzten Literatur eine ausführliche geometrische Auseinandersetzung mit Legendre-Transformationen in allen Dimensionen beinhaltet.

1 Motivation

1.1 Variablentransformationen allgemein

Variablentransformationen (auch "Koordinatentransformationen"genannt) überführen eine Funktion von einem ursprünglichen Koordinatensystem in ein anderes Koordinatensystem mit anderen Variablen, welches je nach Anwendungszweck sinnvoll gewählt werden sollte. Beispiele sind der Übergang von kartesischen zu Polar- oder Kugelkoordinaten, der günstig ist, wenn ein Problem im neuen System einfacher gelöst werden kann. Es muss sich dabei nicht um ein physikalisches Problem handeln, wie das Beispiel des Gauß-Integrals

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2}\,\mathrm{d}x$$

zeigt, welches unter Zuhilfenahme von Polarkoordinaten als $\sqrt{\pi}$ identifiziert wird.
Neben diesen Koordinatentransformationen ist es möglich eine (geometrische) Transformation durchzuführen, deren Form von geometrischen Kenngrößen der Funktion selbst abhängt. Beispielsweise kann man mit der sogenannten Riemannschen Zahlenkugel komplexe Zahlen als Schnittpunkte von Geraden mit der Einheitskugel im $x_1 - x_2 - x_3-$Raum repräsentieren. Die Geraden durchlaufen ausgehend vom Nordpol ($x_1 = 0, x_2 = 0, x_3 = 1$) der Einheitskugel in Richtung der auf der $x_1 - x_2-$Ebene definierten komplexen Zahlenebene stets einen eindeutig zuzuordnenden Schnittpunkt mit der Einheitskugel. Damit kann dieser Schnittpunkt dafür genutzt werden, die komplexen Zahlen zu beschreiben.

Einen ähnlichen Ansatz verfolgt die Legendre-Transformation, um Funktionen zu beschreiben. Hierbei wird z.B. für Funktionen mit einer Veränderlichen eine Tangente an die Funktion angelegt, deren Steigung der Steigung der Funktion am Berührungspunkt[1] entspricht. Der Schnittpunkt der Tangente mit der y-Achse enthält, wenn bestimmte Voraussetzungen[2] erfüllt sind, den kompletten Informationsgehalt der Ursprungsfunktion. Dabei wird jedoch die anfängliche unabhängige Variable in die Steigung der Funktion transformiert.

1.2 Nutzung der Legendre-Transformation in der Physik

In der Physik kommen oft Funktionen vor, die von Variablen abhängig sind, deren Wert nicht direkt bestimmt werden kann. In diesen Fällen kann es zweckmäßig sein, diese Funktionen in Abhängigkeit ihrer eigenen Ableitung nach einer der unabhängigen Variablen zu formulieren. Man betrachte als Beispiel die innere Energie $U = Q + W$, welche zunächst als Funktion $U(S, V, N)$ von der Entropie S, dem Volumen V und der Teilchenanzahl N aufgestellt wird. Die Messbarkeit der extensiven Größe Entropie ist sehr eingeschränkt. Sinnvoller wäre es z.B., eine Funktion $\tilde{U}(T, V, N)$ zu ermitteln, die zwar genau die gleichen Informationen wie $U(S, V, N)$ beinhaltet, jedoch von der direkt messbaren Temperatur abhängt. Für genau diese Variablentransformation gibt es die Legendre-Transformation, da T gerade durch $T = (\frac{\partial U}{\partial S})_{V,N}$ definiert wird. Analog dazu wird in der analytischen Mechanik auf Basis der Lagrange-Funktion $\mathscr{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ mit den generalisierten Koordinaten $\mathbf{q}$ und der Zeit t die Hamiltonfunktion $\mathscr{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ in Abhängigkeit der generalisierten Impulse $\mathbf{p}$ definiert. Auf beide Beispiele wird in Kapitel 3 eingegangen.

1.3 Verständnis der Legendre-Transformation

Die Motivation zur *Nutzung* der Legendre-Transformation in der Physik ist einfach verständlich, jedoch erschließt sich das eigentlich ebenso verständliche Prinzip einer Legendre-Transformation meist nicht anschaulich, obgleich es aus einer simplen geometrischen Überlegung hervorgeht, die im folgenden Kapitel erarbeitet und ausformuliert wird. In manchen Lehrbüchern wird von einer totalen Differentialbetrachtung ausgegangen[3] und daraus die Legendre-Transformation als Ergebnis gefolgert, sodass sie eher als rein mathematisches Mittel zum Kürzen und Ersetzen entsprechender Differentialterme verstanden wird.

2 Herleitung der Legendre-Transformation aus einer geometrischen Betrachtung

2.1 Funktionen einer Veränderlichen

2.1.1 Problemstellung

Gegeben sei eine reelle Funktion $f = f(x)$ mit einer unabhängigen Variablen x. Gesucht ist eine reelle Funktion $\tilde{f} = \tilde{f}(u)$, wobei $u = \frac{df}{dx}$, deren Informationsgehalt gleich dem Informationsgehalt von f ist.

[1] Man spricht bei der Legendre-Transformation auch von einer *Berührungstransformation*.
[2] siehe Kap. 2.1.2
[3] In Kap. 2.1.4 auf Seite 7 wird der Zusammenhang mit der Legendre-Transformation deutlich.

2.1.2 Herleitung

Man betrachte das in Abb.1 dargestellte Beispiel einer Funktion f. An der Stelle x_0 hat f die Steigung $f'(x_0) \equiv u(x_0)$. Ein erster gedanklicher Ansatz ist es, die Umkehrfunktion $x(u)$ von $u(x)$ zu ermitteln und die Funktion $f(x(u))$ zu formulieren. Diese Methode *kann* funktionieren, erfüllt jedoch nicht unsere Bedingung, dass kein Informationsverlust eintreten soll. Der Grund für diese Einschränkung ist, dass in Folge der Ableitung von f Informationen verloren gehen, denn die Angabe von $\frac{df}{dx}$ ermöglicht nur den Rückschluss auf eine Funktionen*schar*, da stets eine frei wählbare Integrationskonstante als Parameter auftritt.

Beispiel 1: Zwei Funktionen
$f_1(x) = e^x \rightarrow u_1(x) = \frac{df_1}{dx} = e^x$
und
$f_2(x) = e^{x-1} \rightarrow u_2(x) = \frac{df_2}{dx} = e^{x-1}$
Es folgt: $x(u_1) = ln(u_1)$, $f_1(x(u_1)) = e^{ln(u_1)} = u_1$.
und: $x(u_2) = ln(u_2) + 1$, $f_2(x(u_2)) = e^{ln(u_2)} = u_2$
Obwohl $f_1(x) \neq f_2(x)$ folgt $f_1(u) = f_2(u)$ bei gegebenem u. Das Ergebnis ist nicht eindeutig.

Folglich ist eine Transformation zu finden, die mehr Informationen enthält als $x(u)$ mit $f(x(u))$. Der Ansatz der Legendre-Transformation zur Lösung dieses Problems für Funktionen einer Veränderlichen ist es, die Tangente an einer gegebenen Stelle x_0 zu betrachten. Veranschaulicht man die Tangentenschar an der Funktion f, so wird ersichtlich, dass ihre Einhüllende die Funktion f selbst ist. Nun ist es die Idee, zu versuchen, jeder Steigung $u(x_0)$ eine eindeutige Kennzahl der jeweiligen Tangente an f zuzuweisen, weil es zur Beschreibung von f unbedeutend ist, wie der gesamte Verlauf der Tangente bei x_0 formuliert werden kann. Dazu eignet sich der Ordinatenabschnitt[4] g. Wie im Folgenden zu sehen ist, kann g einfach hergeleitet werden:

Für die Herleitung betrachte man in Abb.1 den Funktionswert $f(x_0)$. Er ergibt sich z.B. daraus, dass man die Steigung von f bei x_0 ausgehend vom Schnittpunkt der Tangente mit der x-Achse, der hier mit x_s bezeichnet wird, bis x_0 weiterführt. Demnach wird der Abschnitt $x_0 - x_s$ betrachtet, in welchem die bei x_0 anliegende Tangente vom Wert 0 auf $f(x_0) = f'(x_0) \cdot (x_0 - x_s)$ steigt. Was wird durch diese Form von $f(x_0)$ erreicht?
Stellt man die Gleichung um, so erkennt man:

$$f(x_0) = f'(x_0) \cdot x_0 - f'(x_0) \cdot x_s \leftrightarrow f'(x_0) \cdot x_s = f(x_0) - f'(x_0) \cdot x_0$$

Die linke Seite $f'(x_0) \cdot x_s$ kann als Ordinatenabschnitt g mit umgekehrtem Vorzeichen identifiziert werden, weil die hier untersuchte Tangente mit $f'(x_0) > 0$ von $x = 0$ bis $x = x_s$ gerade den Ordinatenatenabschnitt mit positivem Vorzeichen in y-Richtung zurücklegt.

Um nun die gesamte Funktion f durch den Ordinatenabschnitt zu beschreiben, betrachtet man x_0 als die unabhängige Variable, welche ab jetzt als x bezeichnet werden soll. Weil der Informationsgehalt über den Ordinatenabschnitt und

[4] y-Wert des Schnittpunktes einer Funktion mit der y-Achse, der *Ordinate*.

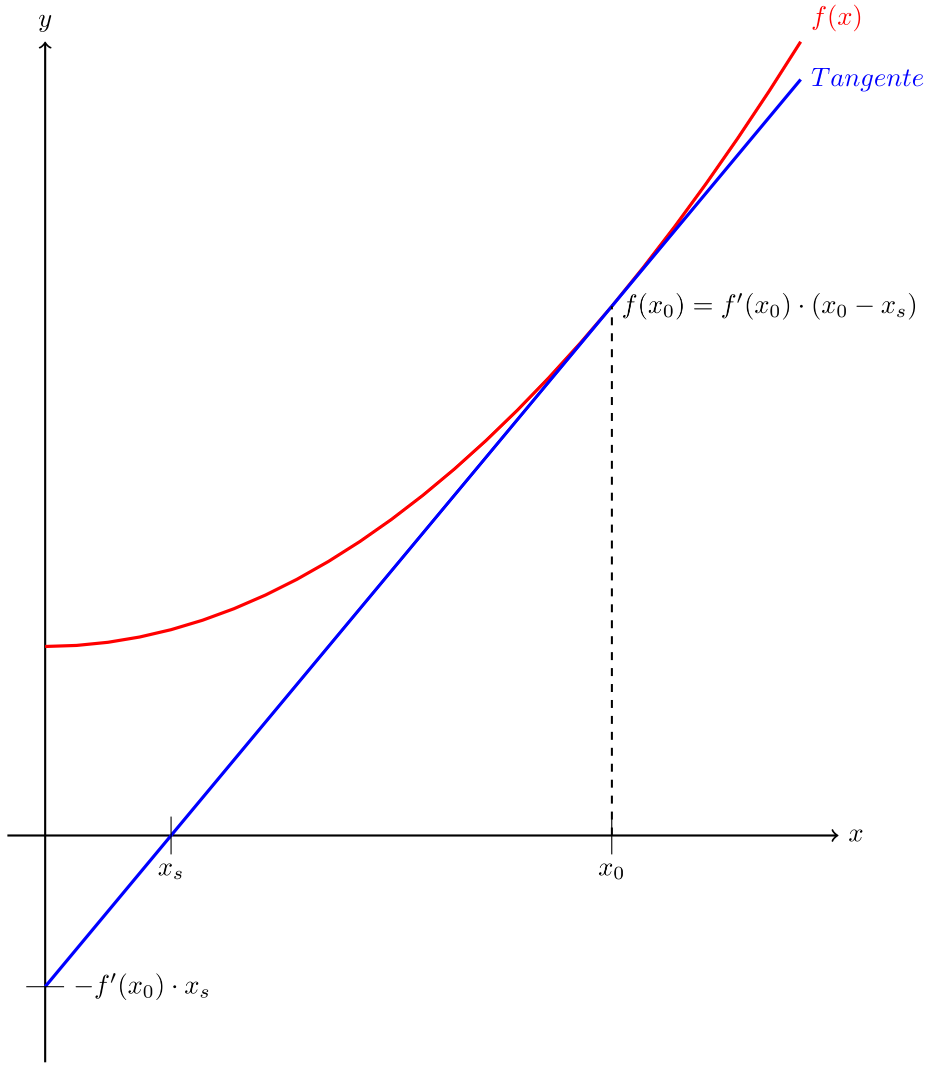

Abbildung 1: Die bei x_0 anliegende Tangente wird durch ihren Ordinatenabschnitt $-f'(x_0) \cdot x_s$ und ihre konstante Steigung $f'(x_0)$ gekennzeichnet. Von x_s bis x_0 wird die vertikale Strecke $f'(x_0) \cdot (x_0 - x_s)$ durchlaufen.

damit verbunden auch über die Funktion f von der Wahl des Vorzeichens unabhängig ist[5], kann man für das von uns gesuchte g anstatt $f(x) - f'(x) \cdot x$ ebenso $f'(x) \cdot x - f(x)$ nutzen[6], wobei hier zunächst die letztgenannte Form benutzt wird.
Mit der anfänglichen Definition $f'(x_0) \equiv u(x_0)$ und der Einführung von x als Variable folgt $f'(x) \equiv u(x)$ und damit $g(u(x)) = u(x) \cdot x - f(x)$ oder für u als unabhängige Variable $g(u) = u \cdot x(u) - f(x(u))$. Beide Formen der Funktion g sind jeweils von nur *einer* Variablen abhängig, weil die Stelle x die Steigung $u(x)$ eindeutig und u die Stelle $x(u)$ eindeutig festlegt.
Durch die obige Herangehensweise wird sichergestellt, dass die Rücktransformation eindeutig ist, sofern einige wenige Bedingungen erfüllt sind:

1. $g(u)$ muss eindeutig durch u bestimmt werden. Infolgedessen ist es nicht zulässig, dass die Funktion f gleiche Steigungen u mehrmals durchläuft. Mathematisch ausgedrückt bedeutet dies, dass $u(x)$ *streng* monoton ist. Es folgt also $\frac{du}{dx} = \frac{d^2 f}{dx^2} \lessgtr 0$.

2. $f(x)$ muss ausreichend oft differenzierbar sein, in Anbetracht der obigen Voraussetzungen also mindestens zwei Mal.

Man erhält demnach eine *Tangentenschar* (jeder Punkt von f hat eine Steigung u und führt somit zu unendlich vielen Tangentengleichungen), deren Ordinatenabschnitt durch $g(u)$ beschrieben wird. Nun ist es also möglich, $f(x)$ durch $g(u)$ vollständig zu beschreiben. Im Folgenden wird diese sogenannte **Legendre-Transformierte** mit einer Tilde gekennzeichnet, hier $\tilde{f} = \tilde{f}(u) = u \cdot x(u) - f(x(u))$.

2.1.3 Rücktransformation

Schreibt man $\tilde{f}(u) = u \cdot x(u) - f(x(u))$ in $\tilde{f}(u) + f(x(u)) = u \cdot x(u)$ um, wird die Symmetrie der Legendre-Transformation deutlich: Für die Rücktransformation zu $f(x(u))$ bedarf es nur der Subtraktion der Legendre-Transformierten in der vorliegenden Gleichung und umgekehrt ergibt sich die Transformation zu $\tilde{f}(u)$ durch Subtraktion von $f(x(u))$. Ein großer Vorteil der Legendre-Transformation ist es demnach, dass sie ihre eigene Rücktransformation ist, was einfach gezeigt werden kann:
$v = v(u) = \frac{d\tilde{f}}{du}$
$= \frac{d}{du}(u \cdot x(u)) - \frac{d[f(x(u))]}{du}$ wird mit der Ketten- und Produktregel zu
$= \frac{d[u]}{du} \cdot x(u) + u \cdot \frac{d[x(u)]}{du} - \frac{d[f(x(u))]}{d(x(u))} \cdot \frac{d[x(u)]}{du}$, wobei $\frac{d[f(x(u))]}{d(x(u))} = u$ per Definition
$= x(u) + u \cdot \frac{d[x(u)]}{du} - u \cdot \frac{d[x(u)]}{du}$
$= x(u)$
Es zeigt sich, dass

$$\tilde{\tilde{f}}(v(u)) = v \cdot u(v) - \tilde{f}(u(v))$$

und somit

$$\tilde{\tilde{f}}(x) = x \cdot u(x) - \tilde{f}(u(x))$$

[5] Man bedenke, dass man mit dem Vorzeichenwechsel nur den Ordinatenabschnitt innerhalb der Ordinate an der Abszisse (x-Achse) spiegelt.
[6] Das Vorzeichen von g kann tatsächlich willkürlich gewählt werden. In der Physik bietet es sich an, das Vorzeichen mit der sinnvollsten physikalischen Bedeutung zu wählen.

$$\Leftrightarrow \tilde{f} = x \cdot u - \tilde{\tilde{f}}$$

Durch einen Vergleich der Terme mit der Definition der Legendre-Transformierten im vorherigen Kapitel resultiert:

$$x \cdot u - \tilde{\tilde{f}} = u \cdot x - f(x) \Leftrightarrow \tilde{\tilde{f}} = f(x)$$

Die wiederholte Legendre-Transformation einer Funktion f ergibt wieder f. Neben der Eindeutigkeit der Rücktransformation kann auch daraus geschlossen werden, dass die Legendre-Transformation ihre eigene Inverse ist.

Wie muss nun eine explizite Rücktransformation durchgeführt werden? Man ermittelt aus $\frac{d\tilde{f}}{du} = x$ eine Funktion $u(x)$, die in $f(x) = x \cdot u(x) - \tilde{f}(u(x))$ eingesetzt werden kann, um die Ursprungsfunktion zu erhalten.

2.1.4 Weitere Schlussfolgerungen

Da $\tilde{f}$ eine Funktion der Steigung u ist, ergibt sich, dass die Lage von Extrempunkten in f einfach bestimmt werden kann. So gilt $f(x_e) = -\tilde{f}(0)$, denn für $u = 0$ bleibt nur der $f(x_e)$-Term übrig.

Man betrachte außerdem das totale Differential von $\tilde{f}$:
$d\tilde{f} = d(u \cdot x) - df = x \cdot du + u \cdot dx - df$
Es gilt $df = \frac{df}{dx} \cdot dx = u \cdot dx$, also folgt:
$d\tilde{f} = x \cdot du + u \cdot dx - u \cdot dx = x \cdot du$
Die Legendre-Transformierte $\tilde{f}$ ist also tatsächlich eine Funktion von u.

Es sei ausdrücklich angemerkt, dass für eine gegebene Steigung $u(x_d)$ nicht $\tilde{f}(u(x_d)) = f(x_d)$ gelten muss. Die Legendre-Transformation überführt $f(x)$ somit nicht in eine Funktion $f(u)$, wie es in Kapitel 2.1.2 anfänglich versucht wurde, sondern in eine eigenständige Funktion $\tilde{f}(u)$, die jedoch $f(x)$ in anderer Kodierung eindeutig beschreibt und rücktransformiert werden kann.

2.2 Funktionen zweier Veränderlicher

2.2.1 Problemstellung

Gegeben sei eine reelle Funktion $f = f(x, y)$ mit den beiden unabhängigen Variablen x und y. Es gibt nun drei verschiedene Möglichkeiten für eine Variablentransformation im Rahmen der Legendre-Transformation: Gesucht ist eine Funktion
a) ... $\tilde{f} = \tilde{f}(u, y)$ mit $u = \frac{\partial f}{\partial x}$...
b) ... $\tilde{f} = \tilde{f}(x, v)$ mit $v = \frac{\partial f}{\partial y}$ ...
c) ... $\tilde{f} = \tilde{f}(u, v)$ ...
... deren Informationsgehalt gleich dem Informationsgehalt von f ist.
Da x und y frei gewählt werden können, sind die Herleitungswege zu a) und b) äquivalent.

2.2.2 Herleitung für die Transformation beider Variablen

Mit zwei unabhängigen Variablen x und y sowie der abhängigen Funktion $f(x, y)$ kann f in 3D dargestellt werden. Das Verfahren der Legendre-Transformation

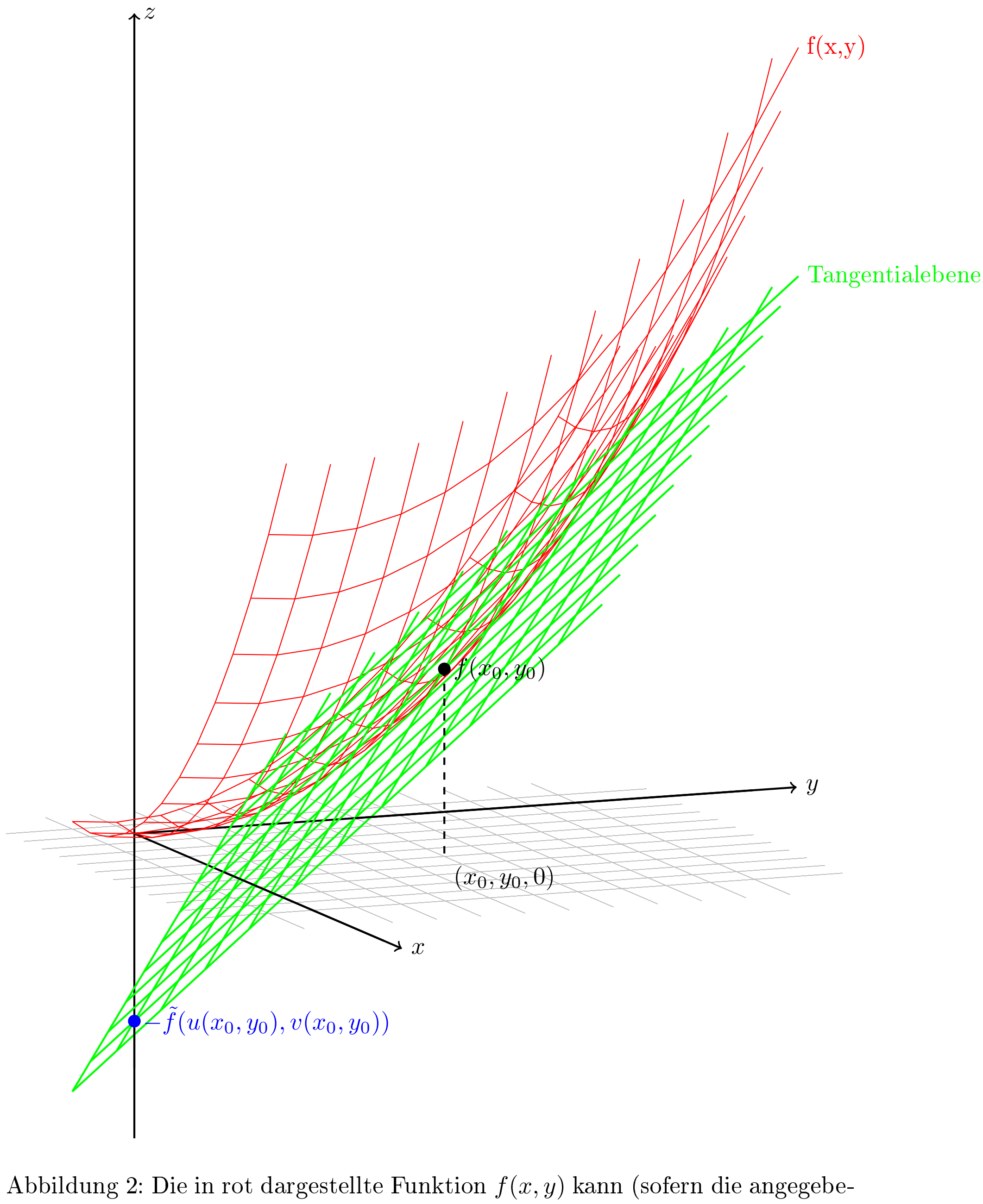

Abbildung 2: Die in rot dargestellte Funktion $f(x, y)$ kann (sofern die angegebenen Voraussetzungen erfüllt sind) durch die Schar der ihr anliegenden Tangentialebenen (grün) beschrieben werden, indem ihr Schnittpunkt mit der z-Achse bei $\tilde{f}(u(x_0, y_0), v(x_0, y_0))$ (blauer Punkt) genutzt wird. Die Tangentialebene bei (x_0, y_0) wird durch den Berührungspunkt $f(x_0, y_0)$ und die dort vorliegenden Steigungen $\frac{\partial f}{\partial x}|_{x_0}$ und $\frac{\partial f}{\partial y}|_{y_0}$ definiert.

für beide Variablen im vorliegenden Fall ist prinzipiell analog zum Verfahren für Funktionen einer Veränderlichen, jedoch werden nun Tangential*ebenen* betrachtet. Die Funktion f wird demnach als Einhüllende einer Tangentialebenenschar aufgefasst und nicht mehr als Einhüllende von Tangenten. Als Kennzahl für die Tangentialebene kann in gleicher Weise wie bei Funktionen mit einer Variablen vorgegangen werden. Zunächst stelle man die Tangentialebenengleichung $T(\hat{x}, \hat{y})$ auf mit den Koordinaten $\hat{x}, \hat{y}$ auf der Tangentialebene, dem Berührungspunkt $f(x_0, y_0)$ (schwarzer Punkt, siehe Abb.2) und den Steigungen $u(x_0, y_0)$ und $v(x_0, y_0)$:

$$T(\hat{x}, \hat{y}) = f(x_0, y_0) + u(x_0, y_0) \cdot (\hat{x} - x_0) + v(x_0, y_0) \cdot (\hat{y} - y_0)$$

Für den Schnittpunkt mit der z-Achse werden $x = 0$ und $y = 0$ gesetzt:

$$T(\hat{x} = 0, \hat{y} = 0) = f(x_0, y_0) - u(x_0, y_0) \cdot x_0 - v(x_0, y_0) \cdot y_0$$

Um die hier genutzte Vorzeichenkonvention beizubehalten, ergibt sich für die Legendre-Transformierte bei einem beliebigen $x_0 = x, y_0 = y$:

$$\tilde{f}(u, v) = u \cdot x(u, v) + v \cdot y(u, v) - f(x(u, v), y(u, v))$$

Zu beachten ist, dass man aus $u(x, y)$ erst $x(u, y)$ bzw. $y(u, x)$ erhält. Aus $y(x, v)$ und $x(y, v)$ müssen danach $x(u, v)$ und $y(u, v)$ bestimmt werden. Das bedeutet, dass das aus den Definitionen der Steigungen bestehende Gleichungssystem gelöst werden muss.
Hier müssen wieder spezielle Voraussetzungen erfüllt werden, um die Möglichkeit dieser Transformation sicherzustellen:

1. Die Funktionen $x(u, v), y(u, v)$ müssen existieren, die Funktion $f(x, y)$ muss somit an den jeweiligen Stellen invertierbar sein. Es muss aus diesem Grund gelten, dass die Determinante der Jacobi-Matrix ungleich Null ist[7]:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} & \frac{\partial u}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} & \frac{\partial v}{\partial y} \end{pmatrix} = \det \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} & \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \end{pmatrix} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \cdot \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} - (\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y})^2 \neq 0$$

2. Wieder muss die Funktion f hinsichtlich beider unabhängiger Variablen zwei Mal differenzierbar sein. Das schließt natürlich auch die Existenz von $\frac{\partial f}{\partial x}$ und $\frac{\partial f}{\partial y}$ ein.

2.2.3 Herleitung für die Transformation einer der Variablen

Soll die Legendre-Transformation nur mit einer der beiden unabhängigen Variablen durchgeführt werden, so handelt es sich nicht mehr um anliegende Tangentialebenen, sondern Tangenten. Doch wie kann die Funktion $f(x, y)$ eindeutig durch diese Tangenten beschrieben werden? Dafür betrachte man die Tangentengleichung[8] $t_y(\hat{x})$ ($\hat{x}$ ist die unabhängige Variable der jeweiligen Tangente) bei x_0:

$$t_y(\hat{x}) = f(x_0, y) + u(x_0, y) \cdot (\hat{x} - x_0)$$

[7] siehe auch Ref. [10] für eine formalere Erläuterung

[8] Die Schreibweise von y als Parameter vermeidet mögliche Irritationen mit der unabhängigen Variablen $\hat{x}$ der jeweils *gleichen* Tangente. Wird $\hat{x}$ geändert, wird eine andere z-Koordinate der Tangente betrachtet, während ein anderes y zu einer anderen Tangente führt.

Selbst dann, wenn x_0 fest gewählt wird, erhält man für jedes y jeweils eine Tangente, für alle y eine Tangentenschar. Wieder wird $t_y(\hat{x} = 0)$ betrachtet, allerdings führt dies nur für $y = 0$ zu einem Schnittpunkt mit der z-Achse. Für $y \neq 0$ erhält man die z-Koordinate des Schnittpunktes der Tangente für ein gewähltes y mit der $x - z$-Ebene. Es folgt bei Respektierung der hier genutzten Vorzeichenkonvention die Legendre-Transformierte:

$$\tilde{f}(u, y) = u \cdot x(u, y) - f(x(u, y), y)$$

Da nur $x(u, y)$ und nicht $x(u, v)$ existieren muss, erfordert die Transformation einer der Variablen nur die Bedingungen, die analog zu Kapitel 2.1.2 sind:

1. $x(u, y)$ muss bei festem y eindeutig durch die Steigung u bestimmt sein, y bleibt eine unabhängige Variable der Transformierten, womit es gleiche x für unterschiedliche y geben kann. Daher wird nur $\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \lessgtr 0$ gefordert.

2. $f(x, y)$ muss nach x zweimal differenzierbar sein.

2.2.4 Rücktransformation

Die Rücktransformation profitiert wieder von der Symmetrie der Legendre-Transformation, ihre eigene Inverse zu sein, und kann prinzipiell wie bei Funktionen einer Veränderlichen durchgeführt werden:
Es gilt

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial u} = x; \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v} = y$$

Aus dem Gleichungssystem müssen jetzt $u(x, y)$ und $v(x, y)$ bestimmt werden und mit

$$f(x, y) = u(x, y) \cdot x + v(x, y) \cdot y - \tilde{f}(u(x, y), v(x, y))$$

erhält man wieder die rücktransformierte Ursprungsfunktion. Sollte nur eine der beiden Variablen x und y einer Legendre-Transformation unterzogen worden sein, muss nur $u(x, y)$ oder $v(x, y)$ mit der Legendre-Transformierten ermittelt werden. Der jeweils andere Term entfällt dann gemäß der Definition von $\tilde{f}(u, y)$ in Kapitel 2.2.3.

2.3 Funktionen von beliebig vielen Veränderlichen

2.3.1 Problemstellung

Gegeben sei eine reelle Funktion $f(\mathbf{x})$ mit den unabhängigen Variablen $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n), n \in \mathbb{N}\backslash\{0\}$. Gesucht ist eine Funktion $\tilde{f}(\mathbf{w}, x_{k+1}, ..., x_n), k \in \mathbb{N}\backslash\{0\}, k < n$ bzw. $\tilde{f}(\mathbf{w}), k = n$ mit[9] $\mathbf{w} = (\frac{\partial f}{\partial x_1}, \frac{\partial f}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_k})$, welche den gleichen Informationsgehalt wie f enthält.

[9]Die entsprechenden unabhängigen Variablen einer Funktion können stets so angeordnet werden, dass die ersten k Variablen solche sind, nach denen f abgeleitet werden soll.

2.3.2 Herleitung für die Transformation beliebig vieler Variablen

Während die Fälle in $(n+1) = 2$ und $(n+1) = 3$ Dimensionen[10] sehr anschaulich erklärt werden können, ist dies bei $(n+1) > 3$ nur eingeschränkt möglich. Letztendlich bleibt die Systematik der Legendre-Transformation dennoch gleich, wobei nun die Änderung von f in allen nicht konstant gehaltenen Richtungen, enthalten in $\mathbf{w}$, bedacht werden muss.
In $(n+1) > 3$ Dimensionen werden keine Tangentialebenen, sondern Tangential-*hyper*ebenen an die Funktion angelegt. Während eine Tangentialebene im dreidimensionalen Raum in Kapitel 2.2.2 durch den jeweiligen Berührungspunkt an der Funktion und *zwei* anliegende Richtungen (definiert durch die Ableitungen nach x und y) charakterisiert wurde, bedarf es bei der Beschreibung einer Tangentialhyperebene an $f(\mathbf{x})$ allgemein im $(n+1)$-dimensionalen Raum dem jeweiligen Berührungspunkt an der Funktion und n anliegenden Richtungen (definiert durch die Ableitungen nach $\mathbf{x}$). Sollen hingegen nur k Ableitungen genutzt werden, so werden die restlichen unabhängigen Variablen $\mathbf{x_{var}} = (x_{k+1}, ..., x_n)$ als Parameter übernommen und die Tangentialhyperebene wird durch k Richtungen definiert.
Ähnlich zur bisherigen Vorgehensweise, wobei nun eine allgemeine Tangentialhyperebenengleichung $T_{\mathbf{x_{var}}}(\hat{\mathbf{x}})$ formuliert wird, folgt demnach für einen gewählten Punkt $\mathbf{x_0}$, der k-dimensional ist[11] und an dem die Tangentialhyperebene anliegt:

$$T_{\mathbf{x_{var}}}(\hat{\mathbf{x}}) = f(\mathbf{x_0}, \mathbf{x_{var}}) + \sum_{i=1}^{k} w_i(\mathbf{x_0}, \mathbf{x_{var}}) \cdot (\hat{x}_i - x_{0_i})$$

Es wird $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{0}$ gesetzt, um die gesuchte Legendre-Transformierte zu erhalten. Der triviale Fall $\mathbf{x_{var}} = \mathbf{0}$ würde dann bedeuten, dass es sich um den Schnittpunkt der Tangentialhyperebene mit der f-Achse handelt.

$$T_{\mathbf{x_{var}}}(\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{0}) = f(\mathbf{x_0}, \mathbf{x_{var}}) - \sum_{i=1}^{k} w_i(\mathbf{x_0}, \mathbf{x_{var}}) \cdot x_{0_i}$$

Für die Legendre-Transformierte sollen $\mathbf{w}$ als Variablen gegeben werden und nicht $\mathbf{w}(\mathbf{x_0}, \mathbf{x_{var}})$ oder $\mathbf{x_0}$. Das erfordert jedoch wieder die (eindeutige) Existenz der Umkehrfunktionen $\mathbf{x_0}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}})$ bzw. komponentenweise $x_{0_k}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}})$. Es seien[12] $\mathbf{x_{tr}} = (x_1, ..., x_k)$ die Variablen, nach welchen transformiert werden soll. Mit der bisher benutzten Vorzeichenkonvention und der Forderung, dass die Legendre-Transformation nicht nur für feste $\mathbf{x_0}$, sondern für variable $\mathbf{x_{tr}}$ gleichermaßen formuliert werden soll, folgt demnach:

$$\tilde{f}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}) = \sum_{i=1}^{k} w_i(\mathbf{x_{var}}) \cdot x_{tr_i}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}) - f(\mathbf{x_{tr}}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}), \mathbf{x_{var}})$$

[10] Die Anzahl der Dimensionen entspricht nicht der Anzahl der unabhängigen Variablen, weil der den n Variablen zugeordnete Funktionswert der $(n+1)$-ten Dimension entspricht. Der Spezialfall $(n+1) = 2$ bezieht sich infolgedessen auf Kap. 2.1 und $(n+1) = 3$ auf Kap. 2.2.

[11] Die übrigen Variablen sollen als solche auch in der Legendre-Transformierten beibehalten werden.

[12] Um die Verwechslung mit dem Vektor $\mathbf{x}$ aus *allen* unabhängigen Variablen von f zu vermeiden, muss $\mathbf{x_{tr}}$ definiert werden.

Dabei kann der Summationsterm durch das Standard-Skalarprodukt ausgedrückt werden:

$$\tilde{f}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}) = \mathbf{w} \cdot \mathbf{x_{tr}}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}) - f(\mathbf{x_{tr}}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}}), \mathbf{x_{var}})$$

Anzumerken ist, dass auch hier die Funktionen $x_{tr_i}(\mathbf{w}, \mathbf{x_{var}})$ durch das Gleichungssystem $\mathbf{w} = (\frac{\partial f}{\partial x_1}|_{x_{tr_1}}, \frac{\partial f}{\partial x_2}|_{x_{tr_2}}, ..., \frac{\partial f}{\partial x_k}|_{x_{tr_k}})$ ermittelt werden müssen.

Die Verallgemeinerung der Bedingungen aus Kapitel 2.2.2, um die Eindeutigkeit bei der Hin- und Rücktransformation zu gewährleisten, lautet damit:

1. Die erforderlichen Ableitungen $\mathbf{w}(\mathbf{x_{tr}}, \mathbf{x_{var}})$ der Funktion $f(\mathbf{x})$ müssen an den betrachteten Stellen invertierbar sein, die Umkehrfunktionen nach $\mathbf{x_{tr}}$ müssen demnach existieren:

$$\det \begin{pmatrix} \frac{\partial w_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial w_1}{\partial x_k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial w_k}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial w_k}{\partial x_k} \end{pmatrix} \neq 0$$

2. Die entsprechenden k Ableitungen zweiten Grades von f, so auch die Ableitungen ersten Grades $\mathbf{w}$, müssen damit existieren.

2.3.3 Rücktransformation

Das Prinzip der Rücktransformation bleibt auch im allgemeinen Fall ähnlich einfach wie für $(n+1) = 2$ und $(n+1) = 3$. Es gilt für alle $j = 1, .., k$, dass

$$\frac{\partial \tilde{f}}{\partial w_j} = x_{tr_j}$$

ist. Man erhält dabei ein Gleichungssystem aus k Gleichungen, woraus auf alle $w_j(\mathbf{x_{tr}}, \mathbf{x_{var}})$ geschlossen werden muss. Die Rücktransformation kann dann als

$$f(\mathbf{x_{tr}}, \mathbf{x_{var}}) = \mathbf{w}(\mathbf{x_{tr}}, \mathbf{x_{var}}) \cdot \mathbf{x_{tr}} - \tilde{f}(\mathbf{w}(\mathbf{x_{tr}}, \mathbf{x_{var}}))$$

geschrieben werden, was gerade $f(\mathbf{x})$ entspricht.

3 Beispiele für Legendre-Transformationen in der Physik

3.1 Analytische Mechanik: Hamilton-Funktion

3.1.1 Motivation

Der Übergang vom Lagrangian $\mathscr{L}$ zum Hamiltonian $\mathscr{H}$ vom Ortsraum zum Phasenraum[13] erscheint bei anfänglicher Betrachtung nicht notwendig, jedoch ist dieser Übergang insbesondere für die Quantenmechanik von zentraler Bedeutung.

[13]Der Ortsraum wird von den generalisierten Koordinaten und den zugehörigen Geschwindigkeit aufgespannt, während der Phasenraum von den generalisierten Koordinaten und den generalisierten *Impulsen* aufgespannt wird.

3.1.2 Herleitung der Hamilton-Funktion

Um von der Lagrange-Funktion $\mathscr{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)$ zur Hamiltonfunktion $\mathscr{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ zu gelangen, eignet sich die Legendre-Transformation, da die generalisierten Impulse p_i, $i = 1, ..., n$, gerade aus $p_i = \frac{\partial \mathscr{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \dot{q}_i}$ bestimmt werden, wobei $\mathbf{p} = (p_1, ..., p_n)$. Mit dieser Beziehung wird nach $\dot{q}_i = \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ (zusammengefasst in $\dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = (\dot{q}_1, ..., \dot{q}_n)$) aufgelöst. Es ergibt sich mit der Legendre-Transformation die Funktion

$$\mathscr{H}(\mathbf{q}, \frac{\partial \mathscr{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)}{\partial \dot{q}}, t) = \mathscr{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t),$$

die durch

$$\mathscr{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^{n} p_i \cdot \dot{q}_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) - \mathscr{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t), t)$$

gegeben ist.

3.2 Thermodynamik: Thermodynamische Potentiale

3.2.1 Grundlagen

Die innere Energie eines thermodynamischen Systems wird zunächst als[14] $U(S, V, N)$ mit der Entropie S, dem Volumen V und der Teilchenzahl N beschrieben. Das Differential $dU = TdS - pdV + \mu dN$ mit der Temperatur T, dem Druck p und dem chemischen Potential μ sei als bekannt vorausgesetzt, sodass Folgendes abgelesen werden kann:

1. $\frac{\partial U}{\partial S} = T$
2. $\frac{\partial U}{\partial V} = -p$
3. $\frac{\partial U}{\partial N} = \mu$

Demnach kann die Legendre-Transformation genutzt werden, um weitere Energiefunktionen zu definieren, die aber nicht von S, V und N abhängen *müssen*, sondern stattdessen von T, p bzw. μ abhängen *können*[15].

3.2.2 Motivation für unterschiedliche Potentiale

Je nachdem, unter welchen Umständen der betrachtete Prozess stattfindet, kann entschieden werden, nach welchen Variablen transformiert werden muss. Die Beweggründe für die Legendre-Transformation nach den oben nummerierten Variablen können sich z.B. wie folgt darstellen:

[14] Die innere (Gesamt-)Energie kann natürlich noch weitere unabhängige Variablen beinhalten.

[15] Wie in vorherigen Kapiteln gezeigt wurde, funktioniert eine Legendre-Transformation i. Allg. nicht nur dann, wenn alle Variablen transformiert werden.

Transformierte Variablen	Begründung
$S \to T$	Die Entropie ist nur *indirekt*[16] messbar, während die Temperatur *direkt* messbar ist.
$V \to p$	Wenn untersucht werden soll, wie sich ein Prozess bei kontrolliertem Druck verhält, ist die Kenntnis über die Abhängigkeit der betrachteten Energie vom Druck von Nutzen. Dies ist beispielsweise der Fall bei chemischen Reaktionen unter Atmosphärendruck[17].
$S \to T$, $V \to p$	Soll zusätzlich zum Druck auch die Temperatur kontrolliert werden, bedarf es ebenso der Transformation nach T.

3.2.3 Herleitung und Definition der Potentiale

Die jeweils resultierenden Potentiale ergeben sich durch die Anwendung der Legendre-Transformation und können der folgenden Tabelle entnommen werden:

Transformierte Variablen	Herleitung und Definition
$S \to T$	$F(T,V,N) = U(S(T,V,N),V,N) - T \cdot S(T,V,N)$ oder kurz $F = U - TS$ **Name:** "freie Energie", "Helmholtz-Potential", engl. "Helmholtz free energy"
$V \to p$	Durch das negative Vorzeichen in (2.) muss $p \cdot V(S,p,N)$ addiert werden: $H(S,p,N) = U(S,V(S,p,N),N) + p \cdot V(S,p,N)$ oder kurz $H = U + pV$ **Name:** "Enthalpie"
$S \to T$, $V \to p$	Wieder ergibt sich mit (2.) ein Vorzeichenwechsel: $G(T,p,N) = U(S(T,p,N),V(T,p,N),N) - T \cdot S(T,p,N) + p \cdot V(T,p,N)$ oder kurz $G = U - TS + pV$ **Name:** "freie Enthalpie", "Gibbs-Energie", "gibbssche freie Enthalpie", "Gibbs-Potential"

4 Zusammenfassung

Die Legendre-Transformation kann vor allem für Funktionen mit weniger als drei unabhängigen Variablen grafisch sehr anschaulich interpretiert werden. Für Funktionen mit einer Veränderlichen werden Ordinatenabschnitte der Funktion anliegender Tangenten benutzt, während es für Funktionen mit zwei Veränderlichen der Betrachtung von Tangentialebenen bedarf, wenn beide Variablen transformiert werden sollen, was jedoch nicht zwingend erforderlich ist.
Für höhere Dimensionen wird das grafische Konzept der Legendre-Transformation auf Tangentialhyperebenengleichungen übertragen.

[16] Die Messung der Entropie geht mit der Änderung eines solchen Systems einher.
[17] siehe Ref. [6, 133]

Bedingt durch die Symmetrie der Legendre-Transformation, ihre eigene Inverse zu sein, können die Rücktransformationen relativ einfach durchgeführt werden. Es zeigt sich, dass die Rücktransformation eindeutig ist, was mit wenigen Forderungen an die Differenzierbarkeit der betrachteten Funktion und der Jacobi-Determinante ihrer Ableitungen (zusammengefasst in einem Vektor) erfüllt wird.

In der Physik ist die Legendre-Transformation v.a. für die Definition thermodynamischer Potentiale wichtig, um das jeweilige Potential in Abhängigkeit der bei unterschiedlichen Prozessen relevanten Umstände (z.B. konstanter Druck) formulieren zu können. Bedeutend ist sie auch für den Übergang von der Lagrange-Funktion zur Hamilton-Funktion.

Literatur

[1] Blanchard, Philippe ; Brüning, Erwin: *Variational Methods in Mathematical Physics - A Unified Approach*. Springer-Verlag, 1992. – S. 107–108

[2] Clegg, J. C.: *Variationsrechnung*. B. G. Teubner, 1970 (Teubner Studienbücher). – S. 118–120

[3] Courant, R. ; Hilbert, D: *Methods Of Mathematical Physics*. Bd. 2. Interscience Publishers, 1965. – S. 32–35

[4] Fliessbach, Torsten: *Lehrbuch zur Theoretischen Physik*. Bd. 1: *Mechanik*. Spektrum Akademischer Verlag, [2009] 2013. – S. 235–238

[5] Goldstein, Herbert: *Klassische Mechanik*. AULA-Verlag GmbH, 1991. – S. 238–241

[6] Greiner, Walter ; Neise, Ludwig ; Stöcker, Horst: *Theoretische Physik*. Bd. 9: *Thermodynamik und Statistische Mechanik*. Verlag Harri Deutsch, 1993. – S. 123–150

[7] Ludwig, Günther: *Einführung in die Grundlagen der Theoretischen Physik*. Bd. 1: *Raum, Zeit, Mechanik*. Bertelsmann Universitätsverlag, 1974. – S. 295–297

[8] Mawhin, Jean ; Willem, Michel: *Applied Mathematical Sciences*. Bd. 74: *Critical Point Theory and Hamiltonian Systems*. Springer-Verlag, 1989. – S. 28–29

[9] Münster, Arnold: *Statistische Thermodynamik*. Springer-Verlag, 1956. – S. 92–95

[10] Nolting, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik*. Bd. 1: *Klassische Mechanik*. Springer-Verlag, 2006. – S. 87–89

[11] Nolting, Wolfgang: *Grundkurs Theoretische Physik*. Bd. 2: *Analytische Mechanik*. Springer-Verlag, 2014. – S. 105–111

[12] Sommerfeld, Arnold: *Vorlesungen über Theoretische Physik*. Bd. 5: *Thermodynamik und Statistik*. Verlag Harri Deutsch, [1977] 2011. – S. 34–35

[13] Tisza, Laszlo: *Generalized Thermodynamics*. The M.I.T. Press, 1966. – S. 61–63

[14] Weidlich, Wolfgang: *Thermodyanmik und statistische Mechanik*. Akademische Verlagsgesellschaft, 1976. – S. 335–337

[15] Zia, R. K. P. ; Redish, Edward F. ; McKay, Susan R.: Making sense of the Legendre transform. In: *American Journal of Physics* 77 (2009), S. 614–622. `http://dx.doi.org/10.1119/1.3119512`. – DOI 10.1119/1.3119512