

# C5.4 Taylor-Entwicklung zur Lösung von Gleichungen

C5.4a

Im Folgenden:  $x$  dimensionslos (ansonsten sind  $x^m$  und  $x^n$  nicht vergleichbar) (1)

$$f(x) = \underbrace{\sum_{n=0}^N \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n}_{\equiv f_N(x)} + \underbrace{\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x^n}_{\equiv R_{N+1}(x)} \equiv C_1 x^{N+1} + C_2 x^{N+2} + \dots$$

nur Potenzen mit  $n > N$

(2)

Formel (C5.3a.3) sagt: wie schnell verschwindet Rest für festes  $x$  wenn  $N \rightarrow \infty$  (3)

Bei 'asymptotischer Entwicklung' ist die Fragestellung anders herum:

Wie schnell verschwindet der Rest für festes  $N$  wenn  $x \rightarrow 0$ ? (4)

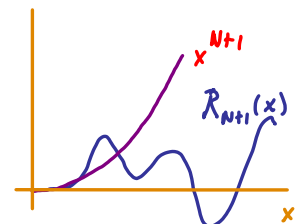
$$\frac{R_{N+1}(x)}{x^{N+1}} \stackrel{(2)}{=} C_1 \frac{x^{N+1}}{x^{N+1}} + C_2 \frac{x^{N+2}}{x^{N+1}} + \dots = C_1 + C_2 x + \dots \xrightarrow{x \rightarrow 0} \boxed{C_1 \text{ konstant}}$$

(5)

(5) impliziert folgendes 'asymptotische Verhalten' für  $x \rightarrow 0$ :

' $R_{N+1}$  verschwindet mindestens so schnell wie  $x^{N+1}$ '

Man sagt: ' $R_{N+1}$  ist von Ordnung  $x^{N+1}$  für  $x \rightarrow 0$ '



Übliche Notation:

$$R_{N+1}(x) = \mathcal{O}(x^{N+1})$$

'Landau groß-O Symbol'

(Edmund Landau, 1877-1938)

Man sagt:  $f(x) = \mathcal{O}(g(x))$  für  $x \rightarrow x_0$  falls  $\frac{|f(x)|}{|g(x)|} \leq \text{const.}$  für  $x \rightarrow x_0$  (1) C5.4b

'f(x) ist von Ordnung g(x)' [  $x_0 = \infty$  auch möglich ]

In der Praxis: der früheste vernachlässigte Term bestimmt Ordnung des Rests:

$$\sin x \stackrel{(C5.1i.11)}{=} x - \frac{1}{3!} x^3 + \frac{1}{5!} x^5 - \frac{1}{7!} x^7 + \frac{1}{9!} x^9 + \dots$$

(1)

$$= x + \mathcal{O}(x^3)$$

(2)

$$= x - \frac{1}{3!} x^3 + \mathcal{O}(x^5)$$

(3)

$$= x - \frac{1}{3!} x^3 + \frac{1}{5!} x^5 + \mathcal{O}(x^7)$$

(4)

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2} x - \frac{1}{8} x^2 + \frac{3}{16} x^3 + \dots$$

(5)

$$= 1 + \mathcal{O}(x)$$

(6)

$$= 1 + \frac{1}{2} x + \mathcal{O}(x^2)$$

(7)

$$= 1 + \frac{1}{2} x - \frac{1}{8} x^2 + \mathcal{O}(x^3)$$

(8)

# Verkettete Reihenentwicklungen

C5.4c

Entwicklung von  $\tan(x)$  um  $x = 0$ , bis inklusive 3. Ordnung:

Lösungsweg 1: Taylor-Reihe (etwas mühsam): berechne

$$\tan'(x), \tan''(x), \tan'''(x) \quad (1)$$

Lösungsweg 2: benutze bekannte Reihenentwicklungen von

$$\sin(x), \cos(x), \frac{1}{1-y} \quad (2)$$

$$\tan x = \frac{\sin x}{\cos x} \stackrel{(C5.1i.11)}{=} \frac{x - \frac{1}{3!}x^3 + \mathcal{O}(x^5)}{1 - \frac{1}{2!}x^2 + \mathcal{O}(x^4)} \quad (3)$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\equiv y = \mathcal{O}(x^2)}$

Nebenrechnung:

Mit welcher Genauigkeit sollte Nenner entwickelt werden?

Nur inklusive  $\mathcal{O}(x^2) = \mathcal{O}(y)$  (4)

$$\frac{1}{1-y} = 1 + y + \mathcal{O}(y^2) \quad (5)$$

$$= 1 + \frac{1}{2}x^2 + \mathcal{O}(x^4) \quad (6)$$

$$\stackrel{(b)}{=} \left[ x - \frac{1}{6}x^3 + \mathcal{O}(x^5) \right] \left[ 1 + \left( \frac{1}{2}x^2 + \mathcal{O}(x^4) \right) \right] \quad (7)$$

$$= \overset{a \cdot d}{x} + \overset{a \cdot e}{x^3} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{6} \right) + \overset{a \cdot f + b \cdot e + c \cdot d}{\mathcal{O}(x^5)} + \overset{b \cdot f + c \cdot e}{\mathcal{O}(x^7)} + \overset{c \cdot f}{\mathcal{O}(x^9)} \quad (8)$$

(in der Praxis ist es unnötig, diese Terme hinzuschreiben)

$$\tan x = x + \frac{1}{3}x^3 + \mathcal{O}(x^5)$$

Wichtig: beachte das konsistente Abzählen der Ordnungen!

(9)

# Reihenentwicklung einer Umkehrfunktion

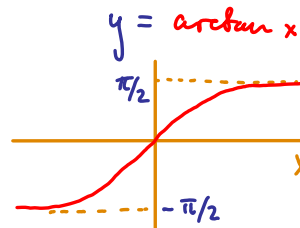
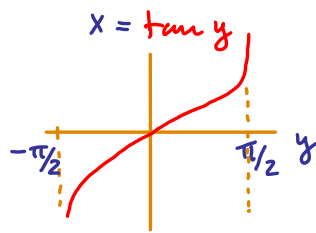
C5.4d

Sei:

$$x = \tan y \quad (1)$$

Umkehrfunktion:

$$y = \arctan x \quad (2)$$



Aufgabe: Bestimme  $\arctan(x) = y(x)$  für  $x \rightarrow 0$ , bis  $\mathcal{O}(x^3)$  inklusive! (3)

$$\text{Reihenansatz: } y(x) = y(0) + y'(0)x + \frac{1}{2!}y''(0)x^2 + \frac{1}{3!}y'''(0)x^3 + \mathcal{O}(x^4) \quad (4)$$

$$= y_0 + y_1 x^1 + \frac{1}{2!}y_2 x^2 + \frac{1}{3!}y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^4) \quad \text{mi } y_n \equiv y^{(n)}(x)|_{x=0} \quad (5)$$

Antisymmetrie:  $\tan(-y) = -\tan y$  (6)

Achtung Indexkonvention:  
Oben: Potenz (nicht Index!)  
Unten: Koeffizientenindex

$$y(-x) = \arctan(-x) = -\arctan(x) = -y(x) \quad (7)$$

Alle geraden Koeffizienten verschwinden:  $y_{2n} = 0$  (8)

Somit vereinfacht sich der Ansatz zu:  $y \stackrel{(d.5,8)}{=} y_1 x' + \frac{1}{3!} y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^5)$  |CS.4e  
(1)

Setze diese Ansatz ein in Ausgangsgleichung (c.1):

$$x \stackrel{(d.1)}{=} \tan y \stackrel{(c.9)}{=} y + \frac{1}{3} y^3 + \mathcal{O}(y^5) \tag{2}$$

$$\stackrel{(1)}{=} \left[ y_1 x' + \frac{1}{3!} y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^5) \right] + \frac{1}{3} \left[ y_1 x + \frac{1}{3!} y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^5) \right]^3 + \mathcal{O}(x^5) \tag{3}$$

$$\underline{x} = \underline{y_1 x} + x^3 \left( \frac{1}{3!} y_3 + \frac{1}{3} y_1^3 \right) + \mathcal{O}(x^5) \tag{4}$$

$\underbrace{\frac{1}{3!} y_3 + \frac{1}{3} y_1^3}_{\equiv 0}$

Linke und rechte Seite müssen in jeder Ordnung von x übereinstimmen!

'Koeffizientenvergleich':  $\mathcal{O}(x)$ :  $y_1 = 1$  (5)

$\mathcal{O}(x^3)$ :  $y_3 = -3! \frac{1}{3} y_1^3 = -2$  (6)

Lösung:  $\arctan x \stackrel{(d.2)}{=} y \stackrel{(1,5,6)}{=} 1 \cdot x - \frac{1}{3} x^3 + \mathcal{O}(x^5)$  (7)

Iteratives Lösen einer Gleichung mittels Reihenentwicklung |CS.4f

Betrachte:  $0 = e^{y(x)-1} - x - \sqrt{y(x)}$  mit  $0 < x \ll 1$  (1)

Finde  $y(x)$  als Funktion v.  $x$  bis Ordnung  $\mathcal{O}(x^2)$  inklusive, d.h. bestimme die

Koeffizienten der ersten drei Terme in der Taylor-Entwicklung:

$$y(x) = y_0 + y_1 x + \frac{1}{2!} y_2 x^2 + \mathcal{O}(x^3) \tag{2}$$

$y_n \equiv y^{(n)}|_{x=0}$

Strategie:  
schreibe (1) als  $0 = F(y(x), x) = F(y_0 + y_1 x + \frac{1}{2!} y_2 x^2 + \mathcal{O}(x^3), x)$  (3)

entwickle F in  
Potenzen von x,  $\equiv F_0(y_0) + F_1(y_0, y_1) x + F_2(y_0, y_1, y_2) x^2 + \mathcal{O}(x^3)$  (4)

setze alle Koeff.  
gleich Null,  $0 = F_0 = F_1 = F_2$  und löse iterativ nach  $y_0, y_1, y_2$  (5)

Anmerkung:  $\frac{1}{n!} F_n(y_0, \dots, y_n) = \frac{d^n}{dx^n} F(y(x), x) \Big|_{x=0}$  (6)

hängt i.A. ab von allen  $y_{i \leq n}$  ab und ist linear in  $y_n$  (7)

Konkret:  $0 \stackrel{(f.1)}{=} e^{y-1} - x - \sqrt{y} \equiv F(y(x), x) \quad (1) \quad \underline{\text{C5.4g}}$

(1)  $|_{x=0}$  :  $0 = e^{y_0-1} - 0 - \sqrt{y_0} \equiv F_0(y_0) \Rightarrow y(0) \equiv y_0 = \boxed{1} \quad (2)$

$\frac{d}{dx} (1)$  :  $0 = y^{(1)} \cdot e^{y-1} - 1 - \frac{1}{2} y^{-1/2} \cdot y^{(1)} \equiv \frac{d}{dx} F(y(x), x) \quad (3)$

$\frac{d}{dx} (1) |_{x=0}$  :  $0 = y_1 \cdot e^{y_0-1} - 1 - \frac{1}{2} y_0^{-1/2} \cdot y_1 \equiv F_1(y_0, y_1) \quad (4)$

(2):  $y_0 = 1$   $0 \stackrel{(4)}{=} y_1 \cdot \underbrace{e^{1-1}}_1 - 1 - \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot y_1 \Rightarrow y^{(1)}(0) \equiv y_1 = \boxed{2} \quad (5)$

$\frac{d^2}{dx^2} (1) = \frac{d}{dx} (3)$  :  $0 = [y^{(2)} + y^{(1)} y^{(1)}] e^{y-1} - 0 + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} y^{-3/2} (y^{(1)})^2 - \frac{1}{2} y^{-1/2} y^{(2)} \equiv \frac{d^2}{dx^2} F(y(x), x) \quad (6)$

$\frac{d^2}{dx^2} (1) |_{x=0}$  :  $0 = [y_2 + (y_1)^2] e^{y_0-1} + \frac{1}{4} y_0^{-3/2} (y_1)^2 - \frac{1}{2} y_0^{-1/2} y_2 \equiv \frac{1}{2!} F_2(y_0, y_1, y_2) \quad (7)$

(2), (5):  $y_0 = 1, y_1 = 2$   $0 = y_2 + 4 + \frac{1}{4} \cdot 1 \cdot 2^2 - \frac{1}{2} \cdot 1 \cdot y_2 \Rightarrow y^{(2)}(0) \equiv y_2 = \boxed{-10} \quad (8)$

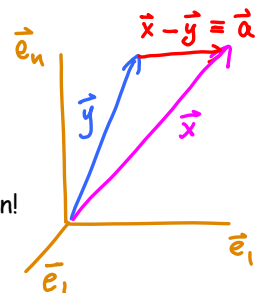
Endergebnis:  $y(x) \stackrel{(f.2)}{=} 1 + 2 \cdot x + \frac{1}{2!} (-10) x^2 + \mathcal{O}(x^3) = 1 + 2x - 5x^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (9)$

C5.5 Höher-dimensionale Taylor-Reihen

C5.5a

(d.7):  $f(x) = f(y+a) \stackrel{(C5.1d.7)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n d_n f(y) \quad (1)$   
n-fache Ableitung

Sei  $f : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $\vec{x} \mapsto f(\vec{x}) \quad (2)$   
Indizes, keine Potenzen!  
 $(x^1, \dots, x^m)$



Verallgemeinerung v. (C5.1d.7):  
 [vorausgesetzt, dass alle Ableitungen existieren und Reihe konvergiert]

$f(\vec{y} + \vec{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n f(\vec{y}) \quad (3)$

wobei  $\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \equiv \sum_{i=1}^m a^i \partial_{y_i}$  partielle Ableitung,  $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial y_i} \equiv \partial_{y_i}$  (4)  
 wirkt per Def. nur auf  $f(\vec{y})$ , nicht auf  $\vec{a} = (\vec{x} - \vec{y})$

$(\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n \equiv \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_n=1}^m a^{i_1} \dots a^{i_n} \partial_{y_{i_1}} \dots \partial_{y_{i_n}}$  (5)  
 alle Ableitungen nach Komponenten von  $\vec{y}$  wirken nur auf  $f(\vec{y})$

Speziell in  $\mathbb{R}^2$

$$\vec{x} = (x^1, x^2), \quad \vec{y} = (y^1, y^2), \quad \vec{x} - \vec{y} = (a^1, a^2) \quad \text{C5.5b}$$

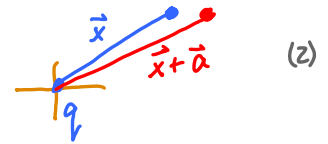
$$f(y^1 + a^1, y^2 + a^2) \stackrel{(0.4)}{=} f(\vec{y}) + (a^1 \partial_1 + a^2 \partial_2) f(\vec{y}) + \frac{1}{2} (a^1 \partial_1 + a^2 \partial_2) (a^1 \partial_1 + a^2 \partial_2) f(\vec{y}) + \mathcal{O}((a^i)^3) \quad (1)$$

$$\hookrightarrow \left[ \frac{1}{2} (a^i)^2 \partial_i^2 + a^1 a^2 \partial_1 \partial_2 + \frac{1}{2} (a^2)^2 \partial_2^2 \right] f(\vec{y}) + \mathcal{O}((a^i)^3)$$

Satz v. Schwarz

Beispiel 1: Coulomb-Potential  
(in CGS-Einheiten)

$$\varphi_c^\pm(\vec{x}) = \pm \frac{q}{|\vec{x}|}$$



[Notationswechsel: ersetze in (C5.5a.3)  $\vec{y}$  durch  $\vec{x}$ .]

$$\varphi_c^\pm(\vec{x} + \vec{a}) \stackrel{(a.3)}{=} \pm q \left[ 1 + a^i \partial_{x^i} + \mathcal{O}((a^i)^2) \right] \varphi_c^\pm(\vec{x}) \quad (3)$$

$$\stackrel{(5)}{=} \pm q \left[ \frac{1}{|\vec{x}|} - \frac{\vec{a} \cdot \vec{x}}{|\vec{x}|^3} + \mathcal{O}((a^i)^2) \right] \quad (4)$$

dabei benutzen wir folgende Identität (für (3,4) brauchen wir  $m=1$ ):

$$\partial_{x^i} \frac{1}{|\vec{x}|^m} = \partial_{x^i} \left( \sum_j x^j x^j \right)^{-\frac{m}{2}} \stackrel{\text{Kettenregel}}{=} -\frac{m}{2} \left( \sum_j x^j x^j \right)^{-\frac{m+2}{2}} 2 x^i = -m \frac{x^i}{|\vec{x}|^{m+2}} \quad (5)$$

Beispiel 2: Potential eines Dipols

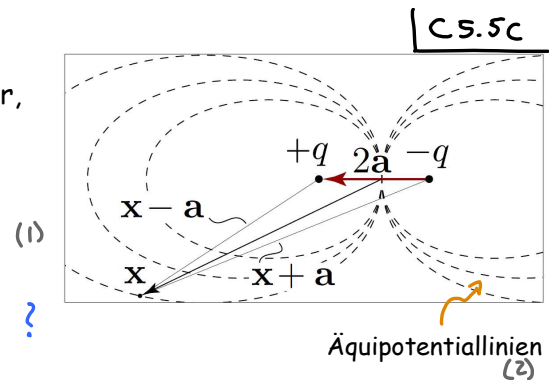
'Dipol' = zwei entgegengesetzte Ladungen nahe beieinander,

z.B.  $+q$  bei  $\vec{a}$  und  $-q$  bei  $-\vec{a}$  :

'Dipolmoment':  $\vec{d} \equiv q \cdot 2\vec{a}$

Was ist das Potential eines Dipols im Limes  $|\vec{x}| \gg |\vec{a}|$  ?

'Punkt dipol'



$$\varphi_D(\vec{x}) = \varphi_c^+(\vec{x} - \vec{a}) + \varphi_c^-(\vec{x} + \vec{a})$$

$$\stackrel{(b.4)}{=} q \left( \frac{1}{|\vec{x}|} + \frac{\vec{a} \cdot \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) - q \left( \frac{1}{|\vec{x}|} - \frac{\vec{a} \cdot \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \right) + \mathcal{O}((a^i)^2) = \frac{\vec{d} \cdot \vec{x}}{|\vec{x}|^3} \quad (3)$$

Elektrisches Feld eines Dipols für  $|\vec{x}| \gg |\vec{a}|$  :

$$\vec{E}_D = -\nabla \varphi_D \stackrel{(4,5)}{=} - \left[ \frac{\vec{d}}{|\vec{x}|^3} - 3 \frac{(\vec{d} \cdot \vec{x}) \vec{x}}{|\vec{x}|^5} \right] \quad (5)$$

Feldrichtung steht senkrecht zu Äquipotentiallinien

$$\partial_i \frac{1}{|\vec{x}|^3} \stackrel{(b.5)}{=} -3 \frac{x_i}{|\vec{x}|^5} \quad (6)$$

### V3.3 Extrema unter Nebenbedingungen

V3.3a

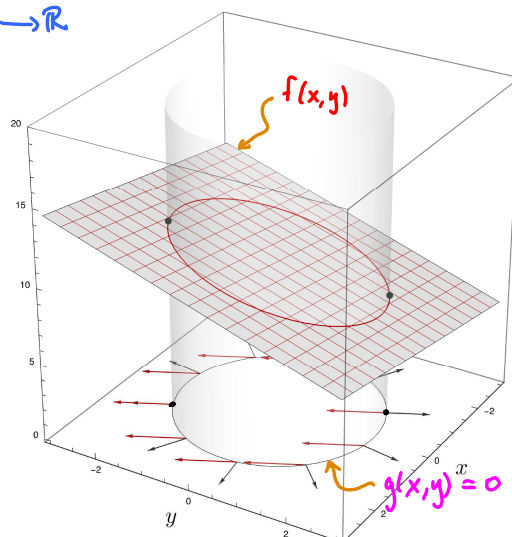
Problemstellung: gegeben  $f: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $g: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$

suche Extrema von  $f(\bar{x})$   
 unter der Nebenbedingung  $g(\bar{x}) = 0$ . (1)

Beispiel 1:  $f(x,y) = 10 + \frac{1}{2}x - y$  (2)

Nebenbedingung:  $g(x,y) = x^2 + y^2 - 4 = 0$  (3)

[besagt: (x,y) liegt auf Kreis mit Radius 2]



Lösungstrategie A: Auflösung der Nebenbedingung

$$y(x) = \pm \sqrt{4 - x^2} \quad (4) \quad \text{und einsetzen in } f:$$

Suche nun Extrema von  $\tilde{f}(x) \equiv f(x, y(x)) \stackrel{(2,4)}{=} 10 + \frac{1}{2}x \mp \sqrt{4 - x^2}$  (5)

$$0 \stackrel{!}{=} \partial_x \tilde{f}(x) = \frac{1}{2} \pm \frac{x}{\sqrt{4 - x^2}} \quad (6) \quad \text{Lösungen: } (x, y)^T = \frac{2}{\sqrt{5}} (\mp 1, \pm 2)^T \quad (7)$$

Lösungstrategie A ist oft unpraktisch: Auflösen der Nebenbedingung von Hand ist häufig nicht möglich; oder, falls mehrere Lösungen existieren, wird es aufwendig...

### Lösungstrategie B: Lagrange-Multiplikator

V3.3b

Geometrische Betrachtung:

Wie findet man Extremum von  $f(x,y)$  falls es keine Nebenbedingung gibt? Laufe in Richtung der maximalen Steigung, d.h. von  $\vec{\nabla} f$ , bis ein Punkt erreicht wird wo

$$\vec{\nabla} f = \vec{0} \quad (1)$$

Wie findet man Extremum von  $f(x,y)$  falls eine Nebenbedingung vorhanden ist? Wie oben, aber mit der Einschränkung, dass nur 'entlang' oder 'parallel zu' der  $(g=0)$ -Linie gelaufen wird, d.h. senkrecht zu  $\vec{\nabla} g$  d.h. in Richtung  $\vec{\nabla}_\perp f$ , wobei

$$\vec{\nabla} f = \vec{\nabla}_\perp f + \vec{\nabla}_\parallel f \quad (2)$$

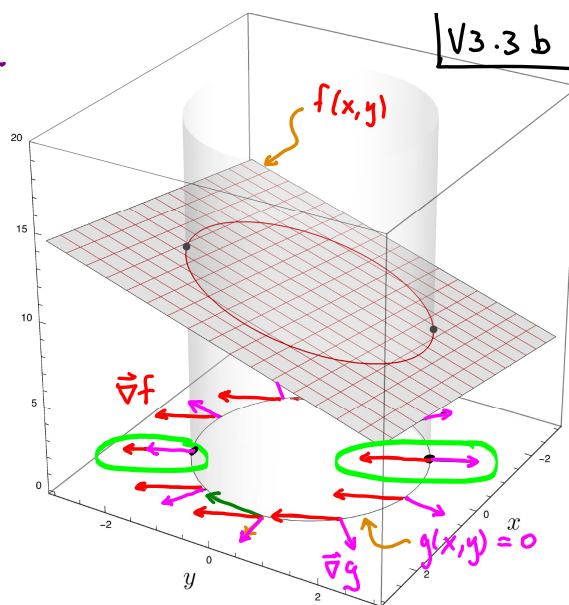


die Zerlegung von  $\vec{\nabla} f$  in Komponenten  $\perp$  und  $\parallel$  zu  $\vec{\nabla} g$  ist.

Ein Extremum v.  $f$ , unter der Nebenbedingung  $g=0$ , ist erreicht wenn  $\vec{\nabla}_\perp f = \vec{0}$ . (3)

Dann kann sich  $f$  nicht mehr ändern, ohne die Nebenbedingung zu verletzen.

An diesem Punkt gilt somit  $\vec{\nabla} f \stackrel{(2,3)}{=} \vec{\nabla}_\parallel f \Rightarrow \vec{\nabla} f \parallel \vec{\nabla} g \Rightarrow \vec{\nabla} f = \lambda \vec{\nabla} g$  (4)



Formale Formulierung:

'Lagrange-Multiplikator'

V3.3c

Bilde die Hilfsfunktion

$$F(\vec{x}; \lambda) \equiv f(\vec{x}) - \lambda g(\vec{x}) \quad (1)$$

[Vorzeichen: reine Konvention, + wäre ebenso möglich.]

Extremalbedingungen (notwendige Bedingungen für Extremum v. f mit  $g = 0$ ):

(i)  $\vec{\nabla} F(\vec{x}; \lambda) \stackrel{!}{=} \vec{0}$  (2) äquivalent zu (b.6):  $\vec{\nabla} f(\vec{x}) = \lambda \vec{\nabla} g(\vec{x})$

(ii)  $\frac{\partial}{\partial \lambda} F(\vec{x}; \lambda) \stackrel{!}{=} 0$  (3) äquivalent zu (a.1):  $g(\vec{x}) = 0$

Nochmal Beispiel 1, mit Lösungsstrategie B:

$$f(\vec{x}) \stackrel{(a.2)}{=} 10 + \frac{1}{2}x - y \quad g(\vec{x}) \stackrel{(a.3)}{=} x^2 + y^2 - 4$$

$$F(\vec{x}, \lambda) = 10 + \frac{1}{2}x - y - \lambda (x^2 + y^2 - 4) \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} F = \frac{1}{2} - 2\lambda x \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} F = -1 - 2\lambda y \stackrel{!}{=} 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} F = -(x^2 + y^2 - 4) \stackrel{!}{=} 0 \quad (7)$$

Eliminiere  $\lambda$ :  $2(5) + (6) = 0 \Rightarrow x = -\frac{1}{2}y$  (8)

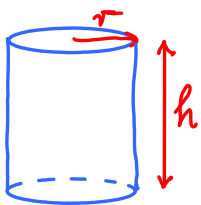
(8) in (7):  $\frac{5}{4}y^2 = 4 \Rightarrow y = \pm \sqrt{\frac{16}{5}}$  (9)

$x = \mp \frac{2}{\sqrt{5}}$  (10)

Beachte: es ist nicht nötig,  $\lambda$  explizit zu bestimmen!

Beispiel 2: Was ist maximales Volumen eines Zylinders gegebener Oberfläche A?

V3.3d



Volumen:

$$\pi r^2 h = V \equiv f(r, h) \quad (1)$$

Oberfläche A = fest:

$$0 = (\underbrace{2\pi r^2}_{\text{Decke + Boden}} + \underbrace{2\pi r h}_{\text{Mantel}}) - A \equiv g(r, h) \quad (2)$$

Nebenbedingung

Bilde Hilfsfunktion:

$$F(r, h; \lambda) \stackrel{(c.1)}{=} \underbrace{\pi r^2 h}_{f(r, h)} - \lambda (\underbrace{2\pi r^2 + 2\pi r h}_{g(r, h)} - A) \quad (3)$$

Extremalbedingungen:

$$\frac{\partial F}{\partial h} \stackrel{(c.2)}{=} \pi r^2 - \lambda 2\pi r \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \lambda = r/2 \quad (4)$$

$$\frac{\partial F}{\partial r} \stackrel{(c.3)}{=} 2\pi r h - \lambda (4\pi r + 2\pi h) \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

(4) in (5)  $\Rightarrow 2\pi r h - (2\pi r^2 + \pi h r) = 0 \Rightarrow h = 2r$  (6)

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = -(2\pi r^2 + 2\pi r h - A) \stackrel{!}{=} 0 \stackrel{(6)}{\Rightarrow} 6\pi r^2 = A \Rightarrow r = \sqrt{\frac{A}{6\pi}} \stackrel{(6)}{=} \frac{h}{2} \quad (7)$$

Maximales Volumen:

$$V \stackrel{(1,7)}{=} 2\pi r^3 \stackrel{(7)}{=} 2\pi \left(\frac{A}{6\pi}\right)^{3/2} \quad (8)$$

## Extremalproblem mit mehreren Randbedingungen

V3.3 e

Allgemeine Formulierung: Finde Extrema von  $f: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  (1)

mit  $k$  Nebenbedingungen  $g_i(\bar{x}) = 0$ , wobei  $g_i: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $i = 1, \dots, k$   
Anzahl Nebenbedingungen  $\left. \vphantom{g_i} \right\}$

Lösungstrategie: Führe  $k$  Lagrange-Multiplikatoren ein,  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, k$

und bilde die Hilfsfunktion  $F(\bar{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = f(\bar{x}) - \sum_{i=1}^k \lambda_i g_i(\bar{x})$  (2)

Extremalbedingungen für Kandidaten für Extrema:  $\vec{\nabla} F(\bar{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = \vec{0}$  (3)

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} F(\bar{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, k \quad (4)$$

## Anwendung aus d. Statistischen Physik: Entropiemaximierung

V3.3 f

Ein Quantensystem mit  $N$  möglichen Zuständen,  $i = 1, \dots, N$ ,

befinde sich mit Wahrscheinlichkeit  $p_i$  in Zustand  $i$ , wobei  $\sum_{i=1}^N p_i = 1$  (1)

Die 'Entropie' des Systems ist:  $S(p_1, \dots, p_N) \equiv - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i$  (2)

Aufgabe 1: bestimme die Wahrscheinlichkeiten  $p_i$ , für die  $S$  maximal ist!

Lösung:  
Bilde Hilfsfunktion:  $\tilde{S}(p_1, \dots, p_N; \lambda) \stackrel{(e.2)}{=} \underbrace{- \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i}_{f(\bar{x})} - \lambda \underbrace{\left( \sum_{i=1}^N p_i - 1 \right)}_{g(\bar{x})}$  (3)  
 $\bar{x} = (p_1, \dots, p_N)$  Nebenbedingung

Extremalbedingungen:

$$\frac{\partial}{\partial p_j} \tilde{S} = - \ln p_j - 1 - \lambda \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow \text{alle } p\text{'s sind gleich: } p_1 = p_2 = \dots = p_N \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \tilde{S} = \sum_{i=1}^N p_i - 1 \stackrel{!}{=} 0 \Rightarrow p_i = \frac{1}{N} \quad (5)$$

Fazit: Entropie ist maximal falls alle Wahrscheinlichkeiten  $p_i$  gleich sind.



Aufgabe 2: Weitere Nebenbedingung: vorgegebene Energie

V3.3g

Sei  $E_i$  die Energie des Quantensystems im Zustand  $i$

Der Mittelwert der Energie ist dann: 
$$E = \sum_{i=1}^N E_i p_i \quad (1)$$

Für gegebenes  $E$ , bestimme die Wahrscheinlichkeiten,  $p_i$  für die  $S$  maximal ist!

Lösung:

Bilde Hilfsfunktion:

$$\tilde{S}(p_1, \dots, p_N; \lambda_1, \lambda_2) \stackrel{(e.2)}{=} - \sum_{i=1}^N p_i \ln p_i - \lambda_1 \left( \sum_{i=1}^N p_i - 1 \right) - \lambda_2 \left( \sum_{i=1}^N E_i p_i - E \right) \quad (2)$$

Nebenbedingung 1
Nebenbedingung 2

Extremalbedingungen:

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial p_j} = - \ln p_j - 1 - \lambda_1 - \lambda_2 E_j \stackrel{!}{=} 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \lambda_1} = \sum_{i=1}^N p_i - 1 \stackrel{!}{=} 0 \quad (4)$$

$$\frac{\partial \tilde{S}}{\partial \lambda_2} = \sum_{i=1}^N E_i p_i - E \stackrel{!}{=} 0 \quad (5)$$

(g.3) liefert:

$$\ln p_j = -(1 + \lambda_1) - \lambda_2 E_j \quad (1) \quad \text{V3.3h}$$

$$p_j = \underbrace{e^{-(1 + \lambda_1)}}_{\equiv Z^{-1}} \underbrace{e^{-\lambda_2 E_j}}_{\equiv e^{-E_j/k_B T}} \quad (2)$$

'Boltzmann-Faktor'

Definiere:  $\lambda_2 \equiv \frac{1}{k_B T}$ ,  $T$  = 'Temperatur',  $k_B$  = 'Boltzmann-Konstante'

(g.4) liefert: 
$$1 = \sum_{i=1}^N p_i \stackrel{(2)}{=} \sum_{i=1}^N Z^{-1} e^{-E_i/k_B T} \quad (3)$$

'Zustandsumme':

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{-E_i/k_B T} \quad (4)$$

(g.5) liefert:

$$E = \sum_{i=1}^N E_i p_i = Z^{-1} \sum_{i=1}^N E_i e^{-E_i/k_B T} \quad (5)$$

Gl. (5) legt die Variable  $T$  so fest, dass mittlere Energie den gewünschten Wert  $E$  hat.

Die Zustandsumme  $Z$  in Gl. (4) ist dann ein Normierungsfaktor, so dass

$$\sum_{i=1}^N p_i = 1$$

Die Form

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/k_B T}$$

heißt 'Boltzmann-Verteilung'.

Zusammenfassung: C5.4 Taylor-Entwicklung zur Lösung v. Gleichungen

ZC 5.4,5

Löse die Gl.  $0 = F(y(x), x)$  mittels einer Reihenentwicklungfür die gesuchte Funktion  $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} y_n x^n$ , mit  $y_n \equiv y^{(n)}|_{x=0}$ 

$$0 = F\left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} y_n x^n, x\right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} F_n(y_0, \dots, y_n) x^n \quad \text{mit} \quad \frac{1}{n!} F_n(y_0, \dots, y_n) = \left. \frac{d^n}{dx^n} F(y(x), x) \right|_{x=0}$$

löse die Gleichungen  $F_n = 0$  iterativ nach  $y_0, y_1, y_2, \dots$ Zusammenfassung: C5.5 Höherdimensionale Taylor-Reihen

$$f(\vec{y} + \vec{a}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n f(\vec{y})$$

$$(\vec{a} \cdot \vec{\nabla})^n = \sum_{i_1=1}^m \dots \sum_{i_n=1}^m \overbrace{a_{i_1} \dots a_{i_n}} \partial_{y^{i_1}} \dots \partial_{y^{i_n}}$$

$$n=2: \quad f(y^1 + a^1, y^2 + a^2) = f(\vec{y}) + (a^1 \partial_1 + a^2 \partial_2) f(\vec{y})$$

$$\left[ \frac{1}{2} (a^1)^2 \partial_1^2 + a^1 a^2 \partial_1 \partial_2 + \frac{1}{2} (a^2)^2 \partial_2^2 \right] f(\vec{y}) + \mathcal{O}(|a^i|^3)$$

Zusammenfassung: V3.3 Extrema mit Nebenbedingungen: Lagrange-Multiplikatoren ZV3.3Finde Extrema von  $f: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ mit  $k$  Nebenbedingungen  $g_i(\vec{x}) = 0$ , wobei  $g_i: U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $i = 1, \dots, k$ Lösungsstrategie: Führe Lagrange-Multiplikatoren ein,  $\lambda_i$ ,  $i = 1, \dots, k$ und bilde Hilfsfunktion:  $F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = f(\vec{x}) - \sum_{i=1}^k \lambda_i g_i(\vec{x})$ Extremalbedingungen:  $\vec{\nabla} F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = 0$ 

$$\frac{\partial}{\partial \lambda_i} F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = 0 \quad \forall i = 1, \dots, k$$