C5.4 Taylor-Entwicklung zur Lösung von Gleichungen

C5.4a

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

(C5.1d.7)

$$f(x) = \underbrace{\sum_{n=0}^{N} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}\, x^n}_{\equiv f_N(x)} + \underbrace{\sum_{n=N+1}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!}\, x^n}_{\equiv R_{N+1}(x)} \equiv c_1 x^{N+1} + c_2 x^{N+2} + \dots \qquad (2)$$

nur Potenzen mit n > N

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

Bei 'asymptotischer Entwicklung' ist die Fragestellung anders herum:

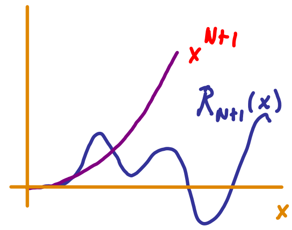
Wie schnell verschwindet der Rest für festes N wenn $x \to 0$? (4)

$$\boxed{\frac{R_{N+1}(x)}{x^{N+1}}} \overset{(2)}{=} c_1 \frac{x^{N+1}}{x^{N+1}} + c_2 \frac{x^{N+2}}{x^{N+1}} + \dots = c_1 + c_2 x + \dots \xrightarrow{x \to 0} \boxed{c_1 \text{ konstant}} \qquad (5)$$

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

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

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



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

'Landau groß-O Symbol'
(Edmund Landau, 1877-1938)

C5.4b

Man sagt: $f(x) = \mathcal{O}(g(x))$ für $x \to x_0$ falls $\dfrac{|f(x)|}{|g(x)|} \le \text{const.}$ für $x \to x_0$ (1)

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

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

(C5.1i.11)

$$\sin x = x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 - \frac{1}{7!}x^7 + \frac{1}{9!}x^9 + \dots \qquad (1)$$

$$= x + \mathcal{O}(x^3) \qquad (2)$$

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

$$= x - \frac{1}{3!}x^3 + \frac{1}{5!}x^5 + \mathcal{O}(x^7) \qquad (4)$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{1}{2}x - \frac{1}{8}x^2 + \frac{3}{16}x^3 + \dots \qquad (5)$$

$$= 1 + \mathcal{O}(x) \qquad (6)$$

$$= 1 + \frac{1}{2}x + \mathcal{O}(x^2) \qquad (7)$$

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

Verkettete Reihenentwicklungen

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

Lösungsweg 1: Taylor-Reihe (etwas mühsam): berechne $\tan'(x)$, $\tan''(x)$, $\tan'''(x)$ (1)

Lösungsweg 2: benutze bekannte Reihenentwicklungen von $\sin(x)$, $\cos(x)$, $\frac{1}{1-y}$ (2)

$$\tan x = \frac{\sin x}{\cos x} \underset{\text{(C5.1j.11)}}{\overset{\text{(C5.1i.11)}}{=}} \frac{x - \frac{1}{3!}x^3 + \mathcal{O}(x^5)}{1 - \underbrace{\frac{1}{2!}x^2 + \mathcal{O}(x^4)}_{\equiv y = \mathcal{O}(x^2)}} \quad (3)$$

Nebenrechnung:

Mit welcher Genauigkeit sollte Nenner entwickelt werden?

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

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

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

$$\overset{(6)}{=} \Big[\overset{a}{x} - \overset{b}{\tfrac{1}{6}x^3} + \overset{c}{\mathcal{O}(x^5)}\Big]\Big[\overset{d}{1} + \big(\overset{e}{\tfrac{1}{2}x^2} + \overset{f}{\mathcal{O}(x^4)}\big)\Big] \quad (7)$$

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

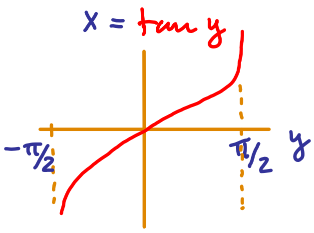
(in der Praxis ist es unnötig, diese Terme hinzuschreiben)

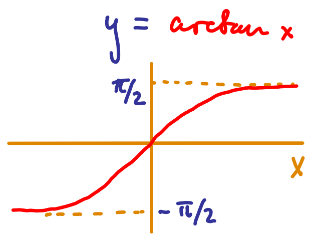
$$\tan x = x + \frac{1}{3}x^3 + \mathcal{O}(x^5)$$

Wichtig: beachte das konsistente Abzählen der Ordnungen! (9)

Reihenentwicklung einer Umkehrfunktion

Sei: $\boxed{x = \tan y}$ (1) Umkehrfunktion: $\boxed{y \equiv \arctan x}$ (2)





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

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

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

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

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

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

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

C5.4e

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

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

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

$$\overset{(1)}{=} \left[y_1 x^1 + \frac{1}{3!} y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^5)\right] + \frac{1}{3}\underbrace{\left[y_1 x + \frac{1}{3!} y_3 x^3 + \mathcal{O}(x^5)\right]^3}_{y_1^3 x^3 + \mathcal{O}(x^5)} + \mathcal{O}(x^5) \quad (3)$$

$$x = y_1 x + x^3 \underbrace{\left(\frac{1}{3!} y_3 + \frac{1}{3} y_1^3\right)}_{\equiv 0} + \mathcal{O}(x^5) \quad (4)$$

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

C5.4f

Iteratives Lösen einer Gleichung mittels Reihenentwicklung

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

$$\boxed{y(x) = y_0 + y_1 x + \frac{1}{2!} y_2 x^2 + \mathcal{O}(x^3)} \qquad \boxed{y_n \equiv y^{(n)}(x)\big|_{x=0}} \quad (2)$$

Strategie:
schreibe (1) als $0 = F(y(x), x) = F\left(\sum_{n=0}^{2} \frac{1}{n!} y_n x^n + \mathcal{O}(x^3), x\right)$ (3)

entwickle F in Potenzen von x, $\equiv \sum_{m=0}^{2} \frac{1}{m!} F_m x^m + \mathcal{O}(x^3)$ (4)

Anmerkung: $F_n = \frac{d^n}{dx^n} F(y(x), x)\Big|_{x=0} = F(y_0, y_1, \dots, y_n)$ (5)

hängt i.A. von allen $y_{i \le n}$ ab und ist linear in y_n (6)

(4) muss gelten für <u>alle</u> $0 \le x \ll 1$
Setze also alle Koeff. gleich Null, $0 = F_0 = F_1 = F_2$ und löse iterativ nach y_0, y_1, y_2 (7)

Konkret: $$0 \overset{(f.1)}{=} e^{y-1} - x - \sqrt{y} \equiv F(y(x),x) \qquad (1)$$

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

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

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

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

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

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

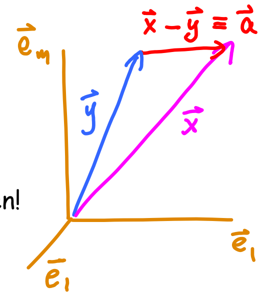
(2),(5): $y_0 = 1$, $y_1 = 2$ $$0 = y_2 + 4 + \frac{1}{4}\cdot 1 \cdot 2^2 - \frac{1}{2}\cdot 1 \cdot y_2 \quad \Rightarrow \quad y^{(2)}(0) \equiv y_2 = \boxed{-10} \qquad (8)$$

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

C5.5 Höher-dimensionale Taylor-Reihen

(d.7): $$f(x) = f(y+a) \overset{(C5.1d.7)}{=} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} a^n d_n f(y) \qquad (1)$$

n-fache Ableitung



Sei $$f : \mathbb{R}^m \longrightarrow \mathbb{R}, \quad \vec x \longmapsto f(\vec x) \qquad (2)$$

$(x^1, \dots, x^m)$ Indizes, keine Potenzen!

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

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

wobei $$\vec a \cdot \vec\nabla \equiv \sum_{i=1}^{m} a^i \partial_{y^i} \qquad (4)$$

partielle Ableitung, $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial y^i} \equiv \partial_{y^i}$

wirkt per Def. nur auf $f(\vec y)$, nicht auf $\vec a = (\vec x - \vec y)$

$$\left(\vec a \cdot \vec\nabla\right)^n \equiv \sum_{i_1=1}^{m} \dots \sum_{i_n=1}^{m} a^{i_1} \dots a^{i_n} \partial_{y^{i_1}} \dots \partial_{y^{i_n}} \qquad (5)$$

alle Ableitungen nach Komponenten von $\vec y$ wirken nur auf $f(\vec y)$

Speziell in $\mathbb{R}^2$ $\vec x = (x^1, x^2)$, $\vec y = (y^1, y^2)$, $\vec x - \vec y = (a^1, a^2)$ C5.5b

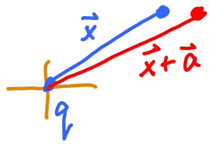
$$f(y^1+a^1,\, y^2+a^2) \overset{(0.4)}{=} f(\vec y) + (a^1\partial_1 + a^2\partial_2) f(\vec y) + \tfrac12 (a^1\partial_1 + a^2\partial_2)(a^1\partial_1 + a^2\partial_2) f(\vec y) + \mathcal{O}((a^i)^3) \qquad (1)$$

$$= \left[\tfrac12 (a^1)^2\partial_1^2 + a^1 a^2 \partial_1\partial_2 + \tfrac12 (a^2)^2\partial_2^2\right] f(\vec y) + \mathcal{O}((a^i)^3)$$

Satz v. Schwarz

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

$$\varphi_C^\pm(\vec x) = \pm \frac{q}{|\vec x|} \qquad (2)$$



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

$$\varphi_C^\pm(\vec x + \vec a) \overset{(a.3)}{=} \pm q \left[1 + a^i \partial_{x^i} + \mathcal{O}((a^i)^2)\right] \overbrace{\frac{1}{|\vec x|}}^{\varphi_C(\vec x)} \qquad (3)$$

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

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

$$\partial_{x^i} \frac{1}{|\vec x|^m} = \partial_{x^i}\Big(\sum_j x^j x^j\Big)^{-\frac m2} \overset{\text{Kettenregel}}{=} -\frac m2 \Big(\sum_j x^j x^j\Big)^{-\frac{m+2}{2}} 2x^i = -m \frac{x^i}{|\vec x|^{m+2}} \qquad (5)$$

Beispiel 2: Potential eines Dipols C5.5c

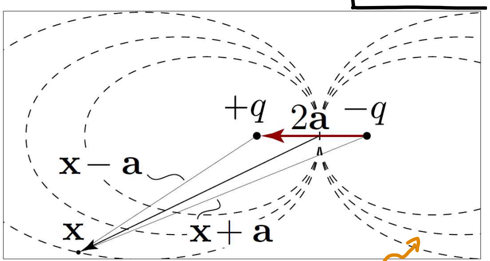
'Dipol' = zwei entgegengesetzte Ladungen nahe beieinander,

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

'Dipolmoment': $\vec d \equiv q\, 2\vec a$ (1)

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

'Punktdipol'



Äquipotentiallinien (2)

$$\varphi_D(\vec x) = \varphi_C^+(\vec x - \vec a) + \varphi_C^-(\vec x + \vec a)$$

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

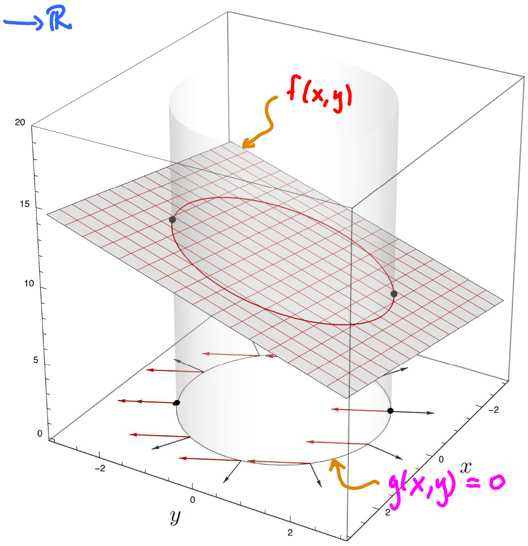
Elektrisches Feld eines Dipols für $|\vec x| \gg |\vec a|$:

$$\vec E_D = -\vec\nabla \varphi_D \overset{(4,5)}{=} \boxed{-\left[\frac{\vec d}{|\vec x|^3} - 3\frac{(\vec d\cdot\vec x)\,\vec x}{|\vec x|^5}\right]} \qquad (5)$$

Feldrichtung steht senkrecht zu Äquipotentiallinien

$$\partial_i \frac{1}{|\vec x|^3} \overset{(b.5)}{\underset{m=3}{=}} -3\, x_i / |\vec x|^5 \qquad (6)$$

V3.3 Extrema unter Nebenbedingungen



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

suche Extrema von $f(\vec{x})$

unter der Nebenbedingung $\boxed{g(\vec{x}) = 0}$. (1)

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

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

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

<u>Lösungstrategie A:</u> Auflösung der Nebenbedingung

$y(x) \overset{(3)}{=} \pm\sqrt{4-x^2}$ (4) und einsetzen in f:

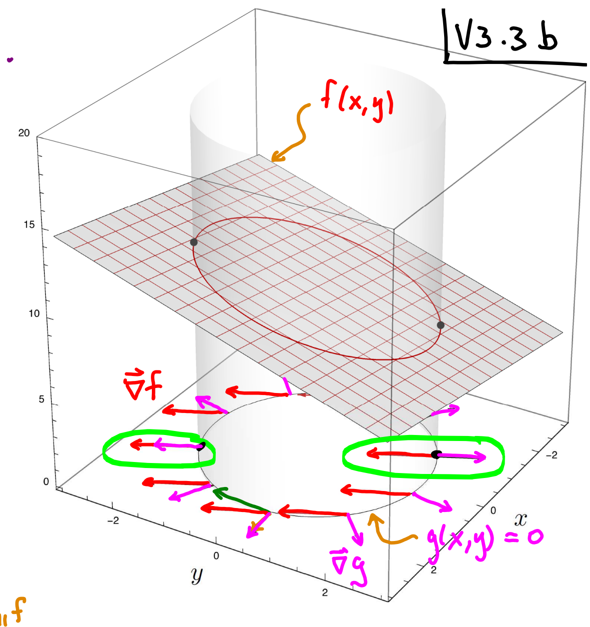
Suche nun Extrema von $\tilde{f}(x) \equiv f(x, y(x)) \overset{(2,4)}{=} 10 + \frac{1}{2}x \mp \sqrt{4-x^2}$ (5)

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

Geometrische Betrachtung:

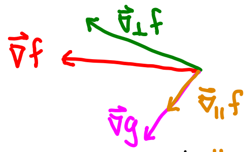


Wie findet man Extremum von f(x,y) falls keine Nebenbedingung gibt? Laufe in Richtung der maximalen Steigung, d.h. von $\vec{\nabla} f$, bis ein Punkt erreicht wird wo

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

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

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



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 $\vec{\nabla} f \overset{(2,3)}{=} \vec{\nabla}_\parallel f \implies \vec{\nabla} f \parallel \vec{\nabla} g \implies \boxed{\vec{\nabla} f = \lambda \vec{\nabla} g}$ (4)

Formale Formulierung: V3.3c

'Lagrange-Multiplikator'

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

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

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

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

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

<u>Nochmal Beispiel 1, mit Lösungstrategie B:</u> $f(\vec{x}) \overset{(a.2)}{=} 10 + \frac{1}{2}x - y$ $\quad g(\vec{x}) \overset{(a.3)}{=} x^2 + y^2 - 4$

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

$$\frac{\partial}{\partial x} F = \frac{1}{2} - 2\lambda x \underset{(2)}{\overset{!}{=}} 0 \qquad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} F = -1 - 2\lambda y \underset{(2)}{\overset{!}{=}} 0 \qquad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} F = -(x^2+y^2-4) \underset{(3)}{\overset{!}{=}} 0 \qquad (7)$$

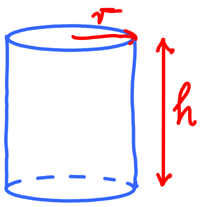
Eliminiere λ: 2(5) + (6) = 0 $\Rightarrow$ $x = -\frac{1}{2}y$ (8)

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

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

Beachte: es ist nicht nötig, λ explizit zu bestimmen!

<u>Beispiel 2: Was ist maximales Volumen eines Zylinders gegebener Oberfläche A?</u> V3.3d



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

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

Nebenbedingung

Bilde Hilfsfunktion:

$$F(r,h;\lambda) \overset{(c.1)}{=} \overbrace{\pi r^2 h}^{f(r,h)} - \lambda\overbrace{(2\pi r^2 + 2\pi r h - A)}^{g(r,h)} \qquad (3)$$

Extremalbedingungen:

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

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

$$\overset{(4)\text{ in }(5)}{\Longrightarrow} \quad 2\pi r h - (2\pi r^2 + \pi h r) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{h = 2r} \qquad (6)$$

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

Maximales Volumen: $V \overset{(1,7)}{=} 2\pi r^3 \overset{(7)}{=} \boxed{2\pi\left(\frac{A}{6\pi}\right)^{3/2}}$ (8)

Extremalproblem mit mehreren Randbedingungen

V3.3 e

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

mit k Nebenbedingungen $g_i(\vec{x}) = 0$, wobei $g_i : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, k$

Anzahl Nebenbedingungen

Lösungsstrategie: Führe k Lagrange-Multiplikatoren ein, λ_i , $i = 1, \dots, k$

und bilde die Hilfsfunktion

$$F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = f(\vec{x}) - \sum_{i=1}^{k} \lambda_i g_i(\vec{x}) \tag{2}$$

Extremalbedingungen
für Kandidaten für Extrema:

$$\boxed{\begin{aligned} &\vec{\nabla} F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = \vec{0} && (3) \\ &\frac{\partial}{\partial \lambda_i} F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = 0 && \forall\, i = 1, \dots, k \quad (4) \end{aligned}}$$

Anwendung aus d. Statistischen Physik: Entropiemaximierung

V3.3 f

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

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:

$\vec{x} = (p_1, \dots, p_N)$

$$\tilde{S}(p_1, \dots, p_N; \lambda) \overset{(e.2)}{=} \underbrace{\overbrace{-\sum_{i=1}^{N} p_i \ln p_i}^{S}}_{f(\vec{x})} - \lambda \Big(\underbrace{\overbrace{\sum_{i=1}^{N} p_i - 1}^{\text{Nebenbedingung}}}_{g(\vec{x})} \Big) \tag{3}$$

Extremalbedingungen:

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

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

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: $E = \sum_{i=1}^{N} E_i p_i$ (1)

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

Lösung:

Bilde Hilfsfunktion:

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

Extremalbedingungen:

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

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

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

V3.3h

(g.3) liefert: $\ln p_j = -(1+\lambda_1) - \lambda_2 E_j$ (1)

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

hängt exponentiell ab von E_j

'Boltzmann-Faktor'

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

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

'Zustandsumme': $\boxed{Z = \sum_{i=1}^{N} e^{-E_j/k_B T}}$ (4)

(g.5) liefert: $E = \sum_{i=1}^{N} E_i p_i = Z^{-1} \sum_{i=1}^{N} E_i\, e^{-E_j/k_B T}$ (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 $\boxed{p_i = \frac{1}{Z} e^{-E_i/k_B T}}$ heisst 'Boltzmann-Verteilung'.

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

ZC5.4,5

Löse die Gl. $0 = F(y(x), x)$ mittels einer Reihenentwicklung

für die gesuchte Funktion $y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} y_n x^n$, mit $y_n \equiv y^{(n)}(x)\big|_{x=0}$

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

löse die Gleichungen $F_n = 0$ iterativ nach $y_0, y_1, y_2, \dots$

Zusammenfassung: C5.5 Höherdimensionale Taylor-Reihen

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

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

$n=2$: $$f(y^1+a^1, y^2+a^2) = f(\vec{y}) + (a^1 \partial_1 + a^2 \partial_2) f(\vec{y})$$
$$\left[\tfrac{1}{2}(a^1)^2 \partial_1^2 + a^1 a^2 \partial_1 \partial_2 + \tfrac{1}{2}(a^2)^2 \partial_2^2\right] f(\vec{y}) + \mathcal{O}((a^i)^3)$$

Zusammenfassung: V3.3 Extrema mit Nebenbedingungen: Lagrange-Multiplikatoren

ZV3.3

Finde Extrema von $f: U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

mit k Nebenbedingungen $g_i(\vec{x}) = 0$, wobei $g_i : U \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, k$

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

und bilde Hilfsfunktion: $$F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda) = f(\vec{x}) - \sum_{i=1} \lambda_i g_i(\vec{x})$$

Extremalbedingungen: $$\vec{\nabla} F(\vec{x}, \lambda_1, \dots, \lambda_k) = 0$$

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