

Über die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen
mit Hilfe der Moore-Penrose-Inversen des
Laplace-Operators im Vektorraum
der Polynomkoeffizienten

Von der Fakultät Energie-, Verfahrens- und Biotechnik
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde einer
Doktor-Ingenieurin (Dr.-Ing.) genehmigte Abhandlung

Vorgelegt von
Bärbel Große-Wöhrmann
aus Hannover

Hauptberichter: Prof. Dr.-Ing. Michael Resch
Mitberichter: Prof. Dr. Gabriel Wittum

Tag der mündlichen Prüfung: 21.11.2023

Höchstleistungsrechenzentrum Stuttgart (HLRS)
2024

Danksagung

Die Entwicklung der in der vorliegenden Arbeit präsentierten Inhalte begann damit, dass Herr Dr.-Ing. Thomas Bönisch mich mit der Aufgabe betraute, die auf der Finite Volumen Methode basierende Software OpenFOAM[®] zu analysieren und Ansätze zur Verbesserung ihrer Skalierbarkeit zu finden. Auf diese Weise weckte Herr Bönisch mein Interesse für die numerische Strömungsmechanik.

Die Suche nach Verbesserungsmöglichkeiten führte mich zu Herrn Dipl.-Math. Uwe Küster. In zahlreichen Gesprächen überzeugte er mich vom Potential des Polynomansatzes zur Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen und ich begann, diesen auszuarbeiten und die Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators erst numerisch und dann analytisch zu entwickeln und zu untersuchen. Seine stets wohlwollende Kritik schärfte meine Methoden und lenkte meinen Blick auf das Wesentliche. Dafür danke ich Herrn Küster sehr.

Diese Arbeit wäre ohne die anregende Atmosphäre des HLRS nicht möglich gewesen. Ich danke Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h.c. Dr. h.c. Hon. Prof. Michael M. Resch für die Möglichkeit, als wissenschaftliche Mitarbeiterin am HLRS tätig zu sein und zur hochaktuellen, interdisziplinären Forschung an diesem einzigartigen Institut beitragen zu können.

Bärbel Große-Wöhrmann

Stuttgart, 23. Januar 2023

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	v
Abbildungsverzeichnis	viii
Tabellenverzeichnis	ix
Zusammenfassung	xi
Abstract	xiii
1 Einleitung	1
1.1 Stand der Technik	1
1.2 Motivation	2
2 Der Vektorraum der Polynomkoeffizienten	5
2.1 Monome und Polynome	5
2.2 Multi-Index-Notation	6
2.3 Koeffizientenvektoren und Skalarprodukt	8
2.4 Transformationen	10
2.5 Zur Wahl der Basis	11
2.6 Das Produkt zweier Monome	14
2.7 Die Darstellung von Differentialoperatoren als Matrizen	16
2.8 Die Darstellung des Laplace-Operators	17
2.9 Mehrfache Anwendung des Laplace-Operators	18

3	Die Aufgabenstellung	21
3.1	Die Moore-Penrose-Inverse für reelle Matrizen	21
3.2	Die Singulärwertzerlegung für reelle Matrizen	22
3.3	Die Blockstruktur des Laplace-Operators bezüglich der Monomräume . . .	24
3.4	Die Darstellungen von $\Delta^T \Delta$ und $\Delta \Delta^T$	26
3.5	Formulierung der Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators	28
4	Sukzessive Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators	31
4.1	Der Vergleich von $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$	31
4.2	Die Singulärwerte und die links-singulären Vektoren	35
4.3	Die rechts-singulären Vektoren und die Moore-Penrose-Inverse	38
4.4	Beispiele: $m = 0$ und $m = 1$	41
4.5	Die Singulärwerte und singulären Vektoren für beliebige Monomgrade . . .	45
4.6	Zur mehrfachen Anwendung des Laplace-Operators	51
5	Vier invariante Unterräume in jedem Monomraum	55
5.1	Definition der vier Unterräume	55
5.2	Die Invarianz der vier Unterräume	59
5.3	Beispiele: $m = 2$ und $m = 3$	62
5.4	Zur sukzessiven Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators	62
6	Kugelflächenfunktionen und die singulären Vektoren des Laplace-Operators	69
6.1	Kugelflächenfunktionen	69
6.2	Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ als Polynome $r^m Y_{l,m_l}$	72
6.3	Zur inversen Wirkung des Laplace-Operators	77
6.4	Zur rekursiven Berechnung der $r^l Y_{l,m_l}$	78
7	Ergebnisse und Ausblick	81
7.1	Ergebnisse	81

7.2	Zeitabhängige partielle Differentialgleichungen mit Randbedingungen . . .	82
	Literaturverzeichnis	87

Abbildungsverzeichnis

5.1	Änderung der Reihenfolge der Summierung	66
7.1	Angeströmte Ecke mit Einlass- und Auslasskanal	82

Tabellenverzeichnis

2.1	Eine mögliche Ordnung der Monome der Basis.	8
4.1	Die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ für gerades m	51
4.2	Die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ für ungerades m	51
5.1	Werte der Exponenten q und Maximalwert \tilde{k}_{\max} für gerades m	57
5.2	Werte der Exponenten q und Maximalwert \tilde{k}_{\max} für ungerades m	58
6.1	Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(1)}$ als homogene Polynome ersten Grades. .	73
6.2	Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(2)}$ als homogene Polynome zweiten Grades. .	74
6.3	Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(3)}$ als homogene Polynome dritten Grades. .	76

Zusammenfassung

Die bekannten numerischen Standard-Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen basieren auf einer räumlichen Diskretisierung des Berechnungsgebiets. Ihre Performance und Skalierbarkeit auf modernen massiv-parallelen Höchstleistungsrechnern ist von der Verfügbarkeit effizienter numerischer Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme abhängig. Angesichts grundlegender Herausforderungen erscheint die Entwicklung neuer Lösungsansätze sinnvoll.

Ich stelle in dieser Arbeit einen Polynomansatz zur Lösung partieller Differentialgleichungen vor, der nicht auf einer räumlichen Diskretisierung beruht und mit Hilfe der Moore-Penrose-Inversen des Laplace-Operators die Entkopplung der Navier-Stokes-Gleichungen ermöglicht. Dabei ist der Grad der Polynome nicht grundsätzlich beschränkt, so dass eine hohe räumliche Auflösung erreicht werden kann.

Die Beschreibung der Polynome erfolgt im Vektorraum der Polynomkoeffizienten, den ich in Kapitel 2 einführe. Die Darstellung der Differentialoperatoren als Matrizen in diesem Vektorraum ermöglicht die Invertierung des Laplace-Operators im Sinne der Moore-Penrose-Inversen, wenn seine Singulärwertzerlegung bekannt ist (siehe Kapitel 3).

Im zentralen Kapitel 4 beweise ich, dass die Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators im Raum der Monome vom Grad $m + 2$ aus der Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators im Raum der Monome vom Grad m folgt, ohne ein lineares Gleichungssystem lösen zu müssen. Dies ermöglicht die sukzessive Berechnung der Moore-Penrose-Inversen für wachsende Monomgrade.

Eine genauere Analyse der Monomräume in Kapitel 5 zeigt auf, dass sich die in Kapitel 4 durchgeführten Berechnungen noch deutlich vereinfachen lassen. Eine Präsentation der Parallelen zum System der orthogonalen Kugelflächenfunktionen in Kapitel 6 rundet meine Darstellung der Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators ab.

Mit der Invertierung des Laplace-Operators im Sinne der Moore-Penrose-Inversen für beliebige Monomgrade ist ein entscheidender Schritt in der Entwicklung des Polynomansatzes zur Lösung partieller Differentialgleichungen erfolgreich durchgeführt worden. Der nächste Schritt beinhaltet die Berücksichtigung von Randbedingungen sowie die Behandlung zeitabhängiger Differentialgleichungen. Meine Vorarbeiten hierzu präsentiere ich im abschließenden Kapitel 7.

Abstract

The known standard numerical methods for the solution of partial differential equations are based on a spatial discretization of the computational domain. Their performance and scalability on modern massively parallel computers depends on the availability of efficient numerical methods for solving systems of linear equations. In view of fundamental challenges, the development of new solution approaches seems reasonable.

In this paper I present a polynomial approach for the solution of partial differential equations which is not based on a spatial discretization and allows the decoupling of the Navier-Stokes equations by means of the Moore-Penrose inverse of the Laplace operator. Thereby, the degree of the polynomials is not fundamentally limited, so that a high spatial resolution can be achieved.

The description of the polynomials is done in the vector space of polynomial coefficients, which I introduce in chapter 2. The representation of the differential operators as matrices in this vector space allows the inversion of the Laplace operator in terms of the Moore-Penrose inverse, if its singular value decomposition is known (see chapter 3).

In the central chapter 4, I prove that the singular value decomposition of the Laplace operator in the space of monomials of degree $m + 2$ follows from its singular value decomposition in the space of monomials of degree m without having to solve a linear system of equations. This allows the successive computation of the Moore-Penrose inverse for growing degrees of monomials.

A more detailed analysis in chapter 5 shows that the calculations performed in chapter 4 can still be simplified considerably. A presentation of the parallels to the system of spherical harmonics in chapter 6 completes my presentation of the singular value decomposition of the Laplace operator.

With the inversion of the Laplace operator in terms of Moore-Penrose inverse for arbitrary polynomials, a crucial step in the development of the polynomial approach to the solution of partial differential equations has been successfully accomplished. The next step involves the consideration of boundary conditions and the treatment of time-dependent differential equations. I present my preliminary work on this in the concluding chapter 7.

1 Einleitung

1.1 Stand der Technik

Viele numerische Simulationen, die zur Lösung technisch-naturwissenschaftlicher Fragestellungen durchgeführt werden, basieren auf physikalisch-mathematischen Modellen, in denen der Laplace-Operator eine zentrale Rolle spielt. Hier sind vor allem die Laplace-Gleichung, die Poisson-Gleichung, die Helmholtz-Gleichung, die Wärmeleitungsgleichung und die Navier-Stokes-Gleichungen zu nennen.

Obwohl seit dem 19. Jahrhundert mathematisch-analytische Lösungen dieser partiellen Differentialgleichungen für spezielle Fälle gefunden wurden, reichen diese nicht für die Behandlung komplexer Fragestellungen aus. Bei den Navier-Stokes-Gleichungen kommt erschwerend hinzu, dass die Kopplung von Druck- und Impulsgleichung sowie die Nicht-Linearität des konvektiven Terms im Allgemeinen eine analytische Lösung verhindern.

Daher werden seit Mitte des 20. Jahrhunderts, parallel zur wachsenden Leistungsfähigkeit der Digitalrechner, numerische Methoden zur Lösung der genannten partiellen Differentialgleichungen entwickelt. Neben Finite Elemente Methoden (FEM) [19] und Spektral Elemente Methoden (SEM) [14, 22] sind Finite Volumen Methoden (FVM) [11, 17] in der numerischen Strömungsmechanik weit verbreitet. Im Rahmen der FVM werden Druckkorrektur-Verfahren wie der SIMPLE-Algorithmus [12, 13] und der PISO-Algorithmus [7] zur Lösung der gekoppelten Navier-Stokes-Gleichungen eingesetzt.

Die genannten Methoden basieren auf einer räumlichen Diskretisierung des Berechnungsgebiets: Das Gebiet wird in kleine Gitterzellen aufgeteilt und die gesuchten Größen werden in jeder Zelle durch lokale Polynome bzw. geeignete Ansatzfunktionen approximiert. Die Simulationen von praxisrelevanten Fragestellungen und turbulenten Strömungen erfordern i. A. eine hohe räumliche Auflösung und somit eine große Anzahl von sehr kleinen Gitterzellen.

Durch die räumliche Diskretisierung werden die partiellen Differentialgleichungen in lineare Gleichungssysteme überführt, deren Größe mit der Anzahl der Gitterzellen wächst und deren effiziente Lösbarkeit auf massiv-parallelen Systemen von der Verfügbarkeit

geeigneter numerischer Verfahren abhängt [1, 2, 5].

Darüber hinaus ist zu beachten, dass die bekannten numerischen Methoden zur Lösung partieller Differentialgleichungen zwar in vielen Anwendungsfällen Simulationen mit praxisrelevanten Ergebnissen ermöglichen, aber zu keinem tieferen Verständnis der mathematischen Eigenschaften der Differentialgleichungen führen.

1.2 Motivation

In dieser Arbeit stelle ich eine Methode zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen vor, die auf der Darstellung von Polynomen im Vektorraum der Polynomkoeffizienten basiert und auf die räumliche Diskretisierung verzichtet. Es wird angenommen, dass sich im Berechnungsgebiet die gesuchten Lösungen der Differentialgleichungen durch Polynome hohen Grades hinreichend genau approximieren lassen. Diese Polynome werden durch ihre Koeffizienten im Vektorraum der Polynomkoeffizienten dargestellt.

Räumliche Differentialoperatoren lassen sich in diesem Vektorraum als Matrizen darstellen und mit den Hilfsmitteln der Linearen Algebra untersuchen. Der entscheidende Punkt ist, dass sich auf diese Weise die Darstellungen der Differentialoperatoren im Sinne der Moore-Penrose-Inversen invertieren lassen. Die zentrale Motivation für diesen Ansatz besteht darin, dass sich die sogenannte Druckgleichung der Navier-Stokes-Gleichungen auflösen und in die Impulsgleichung einsetzen lässt [9]. Dies skizziere ich hier kurz.

Die inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen beschreiben die Evolution des Geschwindigkeitsfeldes $v = v(x, y, z, t)$ eines inkompressiblen Newtonschen Fluids mit konstanter Dichte ρ , konstanter dynamischer Viskosität μ und konstanter kinematischer Viskosität $\nu = \mu/\rho$:

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (\text{Massenerhaltung}) \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} v + (v \cdot \nabla) v = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \Delta v \quad (\text{Impulserhaltung}) \quad (1.2)$$

Das Druckfeld $p = p(x, y, z, t)$ gibt die Differenz zu einem Referenzdruck an. $\Delta = \nabla \cdot \nabla$ bezeichnet den Laplace-Operator, und (x, y, z) und $v = (v_x, v_y, v_z)$ sind Vektoren im dreidimensionalen Raum \mathbb{R}^3 . Generell wird angenommen, dass die Felder v und p genügend oft stetig differenzierbar sind.

Die Anwendung der Bedingung (1.1) auf Gleichung (1.2) ergibt die sogenannte Druckglei-

chung:

$$\nabla \cdot (v \cdot \nabla) v = -\frac{1}{\rho} \Delta p \quad (1.3)$$

Approximiert man nun den Druck und die drei Komponenten der Geschwindigkeit durch Polynome und stellt die Koeffizienten dieser Polynome als Vektoren p , v_x , v_y und v_z im Vektorraum der Polynomkoeffizienten dar, so lautet Gleichung (1.3):

$$\operatorname{div} (v \cdot \operatorname{grad}) v = -\frac{1}{\rho} \Delta p \quad (1.4)$$

Zur besseren Unterscheidung der verschiedenen Verwendungen der Nabla-Operators ∇ bezeichne ich die entsprechenden Matrizen im Vektorraum der Polynomkoeffizienten als div und grad . Nun lässt sich Gleichung (1.4) invertieren:

$$p = -\rho \Delta^\dagger (\operatorname{div} (v \cdot \operatorname{grad}) v) + p_0 \quad (1.5)$$

Die Matrix Δ^\dagger bezeichnet die Moore-Penrose-Inverse des Laplace-Operators, und p_0 ist ein beliebiges harmonisches Polynom, d. h. es gilt:

$$\Delta p_0 = 0$$

Setzt man den Ausdruck (1.5) für p in die im Vektorraum der Polynomkoeffizienten dargestellte Gleichung (1.2) ein, so ergibt sich

$$\frac{\partial}{\partial t} v + (v \cdot \operatorname{grad}) v = \operatorname{grad} \Delta^\dagger (\operatorname{div} (v \cdot \operatorname{grad}) v) - \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p_0 + \nu \Delta v$$

oder auch

$$\frac{\partial}{\partial t} v = -(\operatorname{I} - \operatorname{grad} \Delta^\dagger \operatorname{div}) (v \cdot \operatorname{grad}) v - \frac{1}{\rho} \operatorname{grad} p_0 + \nu \Delta v \quad (1.6)$$

Gleichung (1.6) enthält nur die Komponenten der Geschwindigkeit und den Druck p_0 , der so bestimmt werden muss, dass die Randbedingungen erfüllt werden.

Eine erfolgreiche Entwicklung von Methoden zur Lösung von Gleichung (1.6) im hochdimensionalen Vektorraum der Polynomkoeffizienten muss zwei entscheidende Herausforderungen bewältigen:

1. Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators: Für die Bildung der Moore-Penrose-Inversen Δ^\dagger des Laplace-Operators muss seine Singulärwertzerlegung für im Prinzip beliebig hohe Polynomgrade analytisch oder numerisch bekannt sein, damit eine hinreichend genaue räumliche Auflösung und damit Approximation der gesuchten Lösungen möglich ist. Dieses leiste ich in der vorliegenden Arbeit.

2. Randbedingungen und zeitabhängige Differentialgleichungen: Zur Lösung zeitabhängiger Differentialgleichungen und korrekten Berücksichtigung von Randbedingungen im Vektorraum der Polynomkoeffizienten habe ich bereits Vorarbeiten geleistet, die ich im Kapitel 7 kurz beschreibe. Eine vollständige Ausarbeitung dieser Ansätze überschreitet den Rahmen der vorliegenden Arbeit.

Obwohl die Motivation zur Entwicklung dieser Methoden in erster Linie auf dem Ziel beruht, einer Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen näher zu kommen, werden sich diese Methoden auch auf die anderen, in Abschnitt 1.1 genannten partiellen Differentialgleichungen anwenden lassen. Erwartet werden Erkenntnisse über die beteiligten Differentialoperatoren und Einblicke in die mathematische Struktur der Lösungsräume, aus denen sich Verfahren ableiten lassen, die die existierenden numerischen Lösungsverfahren (siehe Abschnitt 1.1) ergänzen.

Im folgenden Kapitel führe ich den Vektorraum der Polynomkoeffizienten und wichtige Notationen ein. Dies ermöglicht mir, die konkrete Aufgabenstellung dieser Arbeit in Kapitel 3 zu formulieren. In Kapitel 4 präsentiere und beweise ich die zentralen Aussagen dieser Arbeit. Die Berücksichtigung der Struktur der Eigenräume des Laplace-Operators ermöglicht eine Verfeinerung dieser Aussagen und damit einhergehend eine Verringerung des Berechnungsaufwandes und des Speicherbedarfs (siehe Kapitel 5). Meine Darstellung der Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators wird in Kapitel 6 durch das Aufzeigen der Parallelen zum orthogonalen Polynomsystem der Kugelflächenfunktionen abgerundet. Im abschließenden Kapitel 7 nehme ich den roten Faden dieser Einleitung wieder auf, fasse die Ergebnisse dieser Arbeit zusammen und gebe einen Ausblick auf die Behandlung von Randbedingungen und zeitabhängigen Differentialgleichungen.

2 Der Vektorraum der Polynomkoeffizienten

In diesem Kapitel stelle ich diejenigen Eigenschaften des Vektorraums der Polynomkoeffizienten dar, die ich in dieser Arbeit benötige. Für eine tiefer gehende Analyse und umfassende Darstellung verweise ich auf [10].

Neben der Einführung von Notationen ist die Wahl der Basis in Abschnitt 2.5 und die Darstellung des Laplace-Operators als Matrix in Abschnitt 2.8 für die folgenden Kapitel wichtig.

2.1 Monome und Polynome

Es bezeichnen x_1, x_2, x_3 die Koordinaten eines Punktes im dreidimensionalen euklidischen Raum:

$$x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3$$

Definition 2.1. Seien q_1, q_2 und q_3 nicht-negative ganze Zahlen und $a_{(q_1, q_2, q_3)}$ eine reelle Zahl. Dann ist

$$a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \quad (2.1)$$

ein Monom vom Grad $m = q_1 + q_2 + q_3 \geq 0$.

Beispiel 2.1.

$$a_{(2,0,0)} \frac{x_1^2}{\sqrt{2!}} \frac{x_2^0}{\sqrt{0!}} \frac{x_3^0}{\sqrt{0!}} = a_{(2,0,0)} \frac{x_1^2}{\sqrt{2!}} \quad \text{und} \quad a_{(1,1,0)} \frac{x_1^1}{\sqrt{1!}} \frac{x_2^1}{\sqrt{1!}} \frac{x_3^0}{\sqrt{0!}} = a_{(1,1,0)} x_1 x_2$$

sind Monome vom Grad $m = 2$.

Im dreidimensionalen Raum gibt es

$$d_m = \frac{1}{2}(m+1)(m+2) \quad (2.2)$$

linear unabhängige Monome

$$\frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \quad (2.3)$$

vom Grad m (mit $q_1, q_2, q_3 = 0, 1, 2, 3, \dots, m$ und $q_1 + q_2 + q_3 = m$). Diese Monome bilden eine Basis des Vektorraums der Monome vom Grad m .

Definition 2.2. Vektorraum der Monome vom Grad $m \geq 0$.

Mit

$$\mathbb{X}^{(m)} = \{(q_1, q_2, q_3) \mid q_1 + q_2 + q_3 = m\}$$

lässt sich die Menge aller Monome der Form (2.3) als

$$\mathbb{B}^{(m)} = \left\{ \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \mid (q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{X}^{(m)} \right\}$$

schreiben. Der Vektorraum aller Monome vom Grad $m \geq 0$ ist die lineare Hülle von $\mathbb{B}^{(m)}$:

$$\mathcal{L}(\mathbb{B}^{(m)}) = \left\{ \sum_{q_1, q_2, q_3} a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \mid \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \in \mathbb{B}^{(m)}, a_{(q_1, q_2, q_3)} \in \mathbb{R} \right\}$$

Ich bezeichne in dieser Arbeit die Elemente von $\mathbb{B}^{(m)}$ als Basismonome und die Elemente von $\mathcal{L}(\mathbb{B}^{(m)})$ als Monome m -ten Grades. Letztere werden häufig auch als homogene Polynome m -ten Grades bezeichnet.

Ein Polynom vom Grad n ist eine Summe von Monomen vom Grad m mit $0 \leq m \leq n$.

Vektorfelder wie das Geschwindigkeitsfeld v im \mathbb{R}^3 werden durch jeweils drei Polynome beschrieben.

Bemerkung 2.1. In den folgenden Kapiteln verwende ich auch die Bezeichnung (x, y, z) statt $x = (x_1, x_2, x_3)$.

2.2 Multi-Index-Notation

Zur Verbesserung der Übersichtlichkeit verwende ich dreidimensionale Multi-Indizes α :

$$\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \quad \alpha_i = 0, 1, 2, 3, \dots \quad \text{für } i = 1, 2, 3.$$

Ihr Betrag ist als

$$|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$$

definiert. Die Fakultät ist folgendermaßen definiert:

$$\alpha! = \alpha_1! \alpha_2! \alpha_3!$$

Mit $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3)$ gilt:

$$\alpha \geq \beta \iff \alpha_i \geq \beta_i \quad \text{für } i = 1, 2, 3$$

Identitäten, Summen und Differenzen sind komponentenweise definiert:

$$\begin{aligned} \alpha = \beta &\iff \alpha_1 = \beta_1, \alpha_2 = \beta_2 \text{ und } \alpha_3 = \beta_3 \\ \alpha + \beta &= (\alpha_1 + \beta_1, \alpha_2 + \beta_2, \alpha_3 + \beta_3) \\ \alpha - \beta &= (\alpha_1 - \beta_1, \alpha_2 - \beta_2, \alpha_3 - \beta_3), \quad \text{falls } \alpha \geq \beta \end{aligned}$$

Das Kronecker-Delta lautet in Multi-Index-Notation:

$$\delta_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha_1\beta_1} \delta_{\alpha_2\beta_2} \delta_{\alpha_3\beta_3} = \begin{cases} 1, & \text{falls } \alpha_1 = \beta_1, \alpha_2 = \beta_2 \text{ und } \alpha_3 = \beta_3 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Mit dem Multi-Index $q = (q_1, q_2, q_3)$ lässt sich das Monom vom Grad $m = |q|$ in Gleichung (2.1) als

$$a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} = a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}}$$

schreiben. Die Mengen der Definition 2.2 lauten in Multi-Index-Notation folgendermaßen:

$$\begin{aligned} \mathbb{X}^{(m)} &= \{q \mid |q| = m\} \\ \mathbb{B}^{(m)} &= \left\{ \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}^{(m)} \right\} \\ \mathcal{L}(\mathbb{B}^{(m)}) &= \left\{ \sum_q a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \in \mathbb{B}^{(m)}, a_q \in \mathbb{R} \right\} \end{aligned}$$

Auch partielle Ableitungen lassen sich mit Multi-Indizes darstellen. Mit $\partial_i = \partial/\partial x_i, i = 1, 2, 3$, gilt:

$$\partial^\alpha = \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \partial_3^{\alpha_3}$$

Die Multi-Index-Notation ermöglicht im Vektorraum der Polynomkoeffizienten eine Schreibweise von Operatoren analog zu gewöhnlichen Matrizen.

2.3 Koeffizientenvektoren und Skalarprodukt

Die Basismonome, also die Elemente der Mengen $\mathbb{B}^{(m)}$, $m \geq 0$, lassen sich auf verschiedene Weise anordnen. Beispielsweise lässt sich ein Polynom vom Grad n

$$\sum_{\substack{q_1, q_2, q_3 \\ |q| \leq n}} a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} = \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \quad (2.4)$$

(vgl. Definition 2.2) als

$$\sum_{m=0}^n \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^k a_{(m-k, k-l, l)} \frac{x_1^{m-k}}{\sqrt{(m-k)!}} \frac{x_2^{k-l}}{\sqrt{(k-l)!}} \frac{x_3^l}{\sqrt{l!}} \quad (2.5)$$

schreiben.

Beispiel 2.2. $n = 2$: Tabelle 2.1 zeigt die Multi-Indizes $(q_1, q_2, q_3) = (m - k, k - l, l)$ eines Polynoms zweiten Grades in Abhängigkeit von den Parametern m, k und l .

lf. Nr.	m	k	l	$(m - k, k - l, l)$
1	0	0	0	(0, 0, 0)
2	1	0	0	(1, 0, 0)
3	1	1	0	(0, 1, 0)
4	1	1	1	(0, 0, 1)
5	2	0	0	(2, 0, 0)
6	2	1	0	(1, 1, 0)
7	2	1	1	(1, 0, 1)
8	2	2	0	(0, 2, 0)
9	2	2	1	(0, 1, 1)
10	2	2	2	(0, 0, 2)

Tabelle 2.1: Eine mögliche Ordnung der Monome der Basis im Raum der Polynome vom Grad $n = 2$.

Mit der Anordnung der Basismonome ist auch die Reihenfolge der Polynomkoeffizienten a_q in Gleichung (2.4) festgelegt, und letztere können als Vektor im Vektorraum der Polynomkoeffizienten geschrieben werden.

Beispiel 2.3. $n = 2$: Der Koeffizientenvektor

$$a = \begin{pmatrix} a_{(0,0,0)} \\ a_{(1,0,0)} \\ a_{(0,1,0)} \\ a_{(0,0,1)} \\ a_{(2,0,0)} \\ a_{(1,1,0)} \\ a_{(1,0,1)} \\ a_{(0,2,0)} \\ a_{(0,1,1)} \\ a_{(0,0,2)} \end{pmatrix}$$

beschreibt ein Polynom vom Grad $n = 2$ in der in Tabelle 2.1 dargestellten Basis.

Der Unterraum der Monome vom Grad m hat laut Gleichung (2.2)

$$d_m = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$$

Dimensionen und ist isomorph zum \mathbb{R}^{d_m} . Der Koeffizientenvektor, der ein reelles Monom vom Grad m beschreibt, ist ein Vektor im \mathbb{R}^{d_m} mit d_m Komponenten. In diesem Vektorraum der Koeffizientenvektoren ist das euklidische Skalarprodukt zweier Koeffizientenvektoren definiert.

Definition 2.3. Skalarprodukt

Seien a und b zwei Koeffizientenvektoren von Polynomen vom Grad n . Dann ist durch

$$a \cdot b = a^T b = \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q b_q = \sum_{m=0}^n \sum_{\substack{q \\ |q|=m}} a_q b_q$$

ein Skalarprodukt im Vektorraum der Polynomkoeffizienten definiert.

Mit Hilfe des Skalarprodukts wird die Transponierte M^T einer Matrix M definiert.

Definition 2.4. Transponierte Matrix

Sei $m \geq 0$ und M eine $d_m \times d_m$ -Matrix. Dann ist die transponierte Matrix M^T von M durch

$$(M^T a) \cdot b = (M^T a)^T \cdot b = a^T M b = a \cdot (M b) \quad \forall a, b \in \mathbb{R}^{d_m}$$

definiert.

Definition 2.5. Orthogonale Matrix

Eine Matrix M mit

$$M^T M = M M^T = I$$

heißt orthogonale Matrix. I ist die Einheitsmatrix.

Lemma 2.1. Die Multiplikation der Koeffizientenvektoren mit einer orthogonalen Matrix M lässt das Skalarprodukt invariant:

$$(Ma) \cdot (Mb) = a \cdot b$$

Hier sind a und b beliebige Koeffizientenvektoren von Polynomen vom Grad n .

Beweis. Es gilt:

$$(Ma) \cdot (Mb) = (Ma)^T Mb = a^T M^T Mb = a^T b = a \cdot b$$

□

2.4 Transformationen

Definition 2.6. Orthogonale Transformation

Eine Abbildung $R : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ mit

$$x = (x_1, x_2, x_3) \mapsto x' = (x'_1, x'_2, x'_3) = Rx \quad \text{und} \quad x'_i = \sum_{j=1}^3 R_{ij} x_j$$

ist eine Transformation im \mathbb{R}^3 . Falls

$$R^T R = R R^T = I$$

gilt, ist R eine orthogonale Transformation im \mathbb{R}^3 . Diese Bedingung ist äquivalent zu

$$\sum_{j=1}^3 R_{ij} R_{kj} = \sum_{j=1}^3 R_{ji} R_{jk} = \delta_{ik}$$

Durch R wird im Raum der Monome vom Grad m eine Abbildung A_R^m induziert:

$$\frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mapsto \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} = \sum_{\substack{p \\ |p|=m}} (A_R^m)_{pq} \frac{x^p}{\sqrt{p!}}$$

Hier gilt: $|q| = |p| = m$. Polynome n -ten Grades werden unter der Transformation R also folgendermaßen transformiert:

$$\begin{aligned} \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} &\mapsto \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} \\ &= \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q \sum_{\substack{p \\ |p|=|q|}} (A_R^{|q|})_{pq} \frac{x^p}{\sqrt{p!}} \\ &= \sum_{\substack{p \\ |p| \leq n}} \sum_{\substack{q \\ |q|=|p|}} (A_R^{|p|})_{pq} a_q \frac{x^p}{\sqrt{p!}} \end{aligned}$$

Damit geht der Koeffizientenvektor a unter der Transformation R in den Koeffizientenvektor $a' = A_R^{|p|} a$ mit

$$a'_p = \sum_{\substack{q \\ |q|=|p|}} (A_R^{|p|})_{pq} a_q$$

über.

Der Satz 2.1 im folgenden Abschnitt 2.5 besagt, dass die Matrizen A_R^m orthogonal sind, wenn R eine orthogonale Transformation ist. Laut Lemma 2.1 ist dann das Skalarprodukt im Vektorraum der Polynomkoeffizienten invariant.

2.5 Zur Wahl der Basis

Das folgende Lemma dient der Vorbereitung des unten folgenden Satzes 2.1.

Lemma 2.2. *Seien a, b und c reelle Zahlen oder kommutierende Operatoren. Dann gilt:*

$$(a + b + c)^N = \sum_{q, |q|=N} \frac{N!}{q_1! q_2! q_3!} a^{q_1} b^{q_2} c^{q_3}$$

Die Summe läuft über den Multi-Index $q = (q_1, q_2, q_3)$.

Beweis. Unter zweimaliger Anwendung der Binomischen Formel

$$(d + e)^n = \sum_{s=0}^n \frac{n!}{s!(n-s)!} d^s e^{n-s}$$

folgt mit $q_3 \doteq N - q_1 - q_2$:

$$\begin{aligned} (a + b + c)^N &= \sum_{q_1=0}^N \frac{N!}{q_1!(N-q_1)!} a^{q_1} (b + c)^{N-q_1} \\ &= \sum_{q_1=0}^N \sum_{q_2=0}^{N-q_1} \frac{N!}{q_1!(N-q_1)!} \frac{(N-q_1)!}{q_2!(N-q_1-q_2)!} a^{q_1} b^{q_2} c^{N-q_1-q_2} \\ &= \sum_{q_1=0}^N \sum_{q_2=0}^{N-q_1} \frac{N!}{q_1!q_2!q_3!} a^{q_1} b^{q_2} c^{q_3} \\ &= \sum_{q, |q|=N} \frac{N!}{q_1!q_2!q_3!} a^{q_1} b^{q_2} c^{q_3} \end{aligned}$$

□

In der Definition 2.2 der Basismonome

$$\frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} = \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \in \mathbb{B}^{(m)}$$

ist die Wahl des Faktors $1/\sqrt{q!}$ entscheidend, denn er garantiert die Gültigkeit wichtiger Eigenschaften des Vektorraums der Polynomkoeffizienten (siehe [10]). Für diese Arbeit ist die folgende Aussage ausreichend. Ihr Beweis orientiert sich an [18, Chapter III.7].

Satz 2.1. *Sei R eine orthogonale Transformation im \mathbb{R}^3 :*

$$x = (x_1, x_2, x_3) \mapsto x' = (x'_1, x'_2, x'_3) = Rx \quad \text{mit} \quad x'_i = \sum_{j=1}^3 R_{ij} x_j$$

und

$$\sum_{j=1}^3 R_{ij} R_{kj} = \sum_{j=1}^3 R_{ji} R_{jk} = \delta_{ik}$$

Dann ist die durch R im Raum der Monome vom Grad m induzierte Abbildung A_R^m

$$\frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mapsto \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} = \sum_{\substack{p \\ |p|=m}} (A_R^m)_{pq} \frac{x^p}{\sqrt{p!}}$$

mit $|q| = |p| = m$ ebenfalls orthogonal.

Beweis. Wegen

$$\sum_{|q|=m} \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} = \sum_{\substack{p,q,r \\ |p|=|q|=|r|=m}} (A_R^m)_{pq} (A_R^m)_{rq} \frac{x^p}{\sqrt{p!}} \frac{x^r}{\sqrt{r!}}$$

ist A_R^m genau dann orthogonal, wenn

$$\sum_{|q|=m} \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} = \sum_{|q|=m} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \quad (2.6)$$

gilt. Unter Verwendung des Lemmas 2.2 sowie $q_3 \doteq m - q_1 - q_2$ gilt:

$$\begin{aligned} \frac{(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^m}{m!} &= \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3 \\ |q|=m}} \frac{x_1^{2q_1} x_2^{2q_2} x_3^{2q_3}}{q_1! q_2! q_3!} \\ &= \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3 \\ |q|=m}} \frac{x_1^{q_1} x_2^{q_2} x_3^{q_3}}{\sqrt{q_1! q_2! q_3!}} \frac{x_1^{q_1} x_2^{q_2} x_3^{q_3}}{\sqrt{q_1! q_2! q_3!}} \\ &= \sum_{|q|=m} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \end{aligned}$$

Dieselbe Beziehung gilt auch für die gestrichenen Größen:

$$\frac{(x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2)^m}{m!} = \sum_{|q|=m} \frac{x'^q}{\sqrt{q!}} \frac{x'^q}{\sqrt{q!}}$$

Da die orthogonale Transformation R das euklidische Skalarprodukt im \mathbb{R}^3 invariant lässt:

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = x_1'^2 + x_2'^2 + x_3'^2$$

folgt die Gültigkeit der Gleichung (2.6). \square

Da mit R auch A_R^m orthogonal ist, ist laut Lemma 2.1 das Skalarprodukt im Vektorraum der Polynomkoeffizienten invariant unter R . Das Skalarprodukt induziert die Norm $\|a\|^2 = a^T a$ und diese eine Metrik. Der Vektorraum der Polynomkoeffizienten ist also ein normierter Raum.

Falls R symmetrisch ist, ist die zugehörige, durch R induzierte Matrix A_R^m genau dann ebenfalls symmetrisch, wenn der Faktor $1/\sqrt{q!}$ in Definition 2.2 gewählt wird (siehe [10]).

2.6 Das Produkt zweier Monome

In diesem Abschnitt berechne ich das Produkt zweier Monome (auch unterschiedlichen Grades).

Satz 2.2. *Produkt zweier Monome*

Seien

$$\sum_{|k|=m_1} a_k \frac{x^k}{\sqrt{k!}} \quad \text{und} \quad \sum_{|p|=m_2} b_p \frac{x^p}{\sqrt{p!}}$$

zwei Monome vom Grad m_1 und m_2 . Ihr Produkt ist ein Monom vom Grad $m_1 + m_2 = m$ mit dem Koeffizientenvektor

$$c_q = \sum_{|k|=m_1} \sqrt{\binom{q}{k}} a_k b_{q-k}$$

und

$$\binom{q}{k} = \frac{q!}{k!(q-k)!}$$

Dieser Koeffizientenvektor ist das Produkt der Matrix M_b

$$(M_b)_{q,k} = \begin{cases} b_{q-k} \sqrt{\binom{q}{k}}, & \text{für } q - k \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.7)$$

und des Koeffizientenvektors a :

$$c_q = \sum_{|k|=m_1} (M_b)_{q,k} a_k \quad (2.8)$$

Beweis. Mit

$$\sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \\ k_1 + k_2 + k_3 = m_1}} a_{(k_1, k_2, k_3)} \frac{x_1^{k_1} x_2^{k_2} x_3^{k_3}}{\sqrt{k_1! k_2! k_3!}} = \sum_{|k|=m_1} a_k \frac{x^k}{\sqrt{k!}}$$

und

$$\sum_{\substack{p_1, p_2, p_3 \\ p_1 + p_2 + p_3 = m_2}} b_{(p_1, p_2, p_3)} \frac{x_1^{p_1} x_2^{p_2} x_3^{p_3}}{\sqrt{p_1! p_2! p_3!}} = \sum_{|p|=m_2} b_p \frac{x^p}{\sqrt{p!}}$$

folgt unter der Verwendung von $q = k + p$ und $|q| = |k| + |p| = m_1 + m_2 = m$ für das

Produkt von a und b :

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \\ k_1+k_2+k_3=m_1}} \sum_{\substack{p_1, p_2, p_3 \\ p_1+p_2+p_3=m_2}} a_{(k_1, k_2, k_3)} b_{(p_1, p_2, p_3)} \frac{x_1^{k_1+p_1} x_2^{k_2+p_2} x_3^{k_3+p_3}}{\sqrt{k_1! k_2! k_3!} \sqrt{p_1! p_2! p_3!}} \\
 &= \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \\ k_1+k_2+k_3=m_1}} \sum_{\substack{p_1, p_2, p_3 \\ p_1+p_2+p_3=m_2}} a_{(k_1, k_2, k_3)} b_{(p_1, p_2, p_3)} \\
 & \quad \times \frac{\sqrt{(k_1+p_1)!(k_2+p_2)!(k_3+p_3)!}}{\sqrt{k_1! k_2! k_3!} \sqrt{p_1! p_2! p_3!}} \frac{x_1^{k_1+p_1} x_2^{k_2+p_2} x_3^{k_3+p_3}}{\sqrt{(k_1+p_1)!(k_2+p_2)!(k_3+p_3)!}} \\
 &= \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \\ k_1+k_2+k_3=m_1}} \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3 \\ q_1+q_2+q_3=m}} a_{(k_1, k_2, k_3)} b_{(q_1-k_1, q_2-k_2, q_3-k_3)} \\
 & \quad \times \frac{\sqrt{q_1! q_2! q_3!}}{\sqrt{k_1! k_2! k_3!} \sqrt{(q_1-k_1)!(q_2-k_2)!(q_3-k_3)!}} \frac{x_1^{q_1} x_2^{q_2} x_3^{q_3}}{\sqrt{q_1! q_2! q_3!}} \\
 &= \sum_{|q|=m} \sum_{|k|=m_1} a_k b_{q-k} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{k!} \sqrt{(q-k)!}} \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \\
 &= \sum_{|q|=m} c_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}}
 \end{aligned}$$

Hier gilt:

$$c_q = \sum_{|k|=m_1} a_k b_{q-k} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{k!} \sqrt{(q-k)!}} = \sum_{|k|=m_1} a_k b_{q-k} \sqrt{\binom{q}{k}}$$

Der Koeffizientenvektor c_q kann als Produkt der Matrix M_b

$$(M_b)_{q,k} = \begin{cases} b_{q-k} \sqrt{\binom{q}{k}}, & \text{für } q-k \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

und des Koeffizientenvektors a dargestellt werden, denn es gilt:

$$c_q = \sum_{|k|=m_1} (M_b)_{q,k} a_k$$

□

2.7 Die Darstellung von Differentialoperatoren als Matrizen

Satz 2.3. *Sei*

$$\partial^\alpha = \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \partial_3^{\alpha_3}$$

ein Differentialoperator $|\alpha|$ -ter Ordnung (vgl. Abschnitt 2.2). Er wird im Vektorraum der Polynomkoeffizienten durch die Matrix

$$\mathbf{D}_{pq}^\alpha = \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p, q-\alpha}$$

dargestellt.

Beweis. Für ein Polynom n -ten Grades gilt:

$$\begin{aligned} \partial^\alpha \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} &= \partial_1^{\alpha_1} \partial_2^{\alpha_2} \partial_3^{\alpha_3} \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3 \\ |q| \leq n}} a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \\ &= \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3, q_i \geq \alpha_i \\ |q| \leq n}} a_{(q_1, q_2, q_3)} q_1(q_1 - 1) \cdots (q_1 - \alpha_1 + 1) \\ &\quad \times q_2(q_2 - 1) \cdots (q_2 - \alpha_2 + 1) q_3(q_3 - 1) \cdots (q_3 - \alpha_3 + 1) \\ &\quad \times \frac{x_1^{q_1 - \alpha_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2 - \alpha_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3 - \alpha_3}}{\sqrt{q_3!}} \\ &= \sum_{\substack{q_1, q_2, q_3, q_i \geq \alpha_i \\ |q| \leq n}} a_{(q_1, q_2, q_3)} \sqrt{q_1} \sqrt{q_1 - 1} \cdots \sqrt{q_1 - \alpha_1 + 1} \\ &\quad \times \sqrt{q_2} \sqrt{q_2 - 1} \cdots \sqrt{q_2 - \alpha_2 + 1} \sqrt{q_3} \sqrt{q_3 - 1} \cdots \sqrt{q_3 - \alpha_3 + 1} \\ &\quad \times \frac{x_1^{q_1 - \alpha_1}}{\sqrt{(q_1 - \alpha_1)!}} \frac{x_2^{q_2 - \alpha_2}}{\sqrt{(q_2 - \alpha_2)!}} \frac{x_3^{q_3 - \alpha_3}}{\sqrt{(q_3 - \alpha_3)!}} \\ &= \sum_{\substack{q, q \geq \alpha \\ |q| \leq n}} a_q \sqrt{\frac{q!}{(q - \alpha)!}} \frac{x^{q - \alpha}}{\sqrt{(q - \alpha)!}} \end{aligned}$$

Der Koeffizientenvektor a_q wird also auf a'_p mit

$$a'_p = \sum_{\substack{q \\ |q| \leq n}} \mathbf{D}_{pq}^\alpha a_q = \sum_{\substack{q, q \geq \alpha \\ |q| \leq n}} \sqrt{\frac{q!}{p!}} a_q \delta_{p, q-\alpha}$$

abgebildet. Folglich wird der Differentialoperator ∂^α im Vektorraum der Polynomkoeff-

fizienten durch die Matrix

$$\mathbf{D}_{pq}^\alpha = \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p,q-\alpha}$$

dargestellt. □

2.8 Die Darstellung des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten

Für den Laplace-Operator $\Delta = \text{div grad}$ gilt:

$$\Delta = \partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2 = \partial^{(2,0,0)} + \partial^{(0,2,0)} + \partial^{(0,0,2)} \quad (2.9)$$

Die den Laplace-Operator im Vektorraum der Polynomkoeffizienten darstellende Matrix ist nach Satz 2.3 also

$$\Delta_{pq} = \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p,q-(2,0,0)} + \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p,q-(0,2,0)} + \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p,q-(0,0,2)} \quad (2.10)$$

Die Multi-Indizes p und q nehmen alle möglichen Werte unter der Bedingung $|q| = |p| + 2$ an. Für jedes Paar (p, q) ist höchstens einer der drei Summanden von Null verschieden. Für $|q| < 2$ sind alle Matrixelemente gleich Null.

Der erste Summand in Gleichung (2.10) lässt sich folgendermaßen umformen:

$$\begin{aligned} \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p,q-(2,0,0)} &= \sqrt{\frac{q!}{(q - (2, 0, 0))!}} \delta_{p,q-(2,0,0)} = \sqrt{\frac{q_1!}{(q_1 - 2)!}} \delta_{p,q-(2,0,0)} \\ &= \sqrt{q_1(q_1 - 1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} \end{aligned}$$

Da für den zweiten und dritten Summanden analoge Umformungen gelten, folgt:

$$\Delta_{pq} = \sqrt{q_1(q_1 - 1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} + \sqrt{q_2(q_2 - 1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3 - 1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \quad (2.11)$$

Beispiel 2.4. Das Monom $x_1^2/\sqrt{2!}$ wird auf $\sqrt{2}$ abgebildet:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) \frac{x_1^2}{\sqrt{2!}} \frac{x_2^0}{\sqrt{0!}} \frac{x_3^0}{\sqrt{0!}} = \sqrt{2} \frac{x_1^0}{\sqrt{0!}} \frac{x_2^0}{\sqrt{0!}} \frac{x_3^0}{\sqrt{0!}} = \sqrt{2}$$

Wählt man die in Tabelle 2.1 auf Seite 8 aufgeführte Reihenfolge der Basismonome, so

stellt die Matrix

$${}_{(0,0,0)} \begin{matrix} & (0,0,0) & (1,0,0) & (0,1,0) & (0,0,1) & (2,0,0) & (1,1,0) & (1,0,1) & (0,2,0) & (0,1,1) & (0,0,2) \\ (0,0,0) & \left(\begin{array}{cccccccccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \cdot & \sqrt{2} \end{array} \right) \end{matrix}$$

den Laplace-Operator in dieser Basis dar.

Matrixkoeffizienten gleich Null werden der Übersichtlichkeit halber als Punkt \cdot dargestellt. Die Multi-Indizes $(0, 0, 0)$, $(1, 0, 0)$, \dots oberhalb der ersten Zeile der Matrix und der Multi-Index $(0, 0, 0)$ links neben der ersten Spalte bezeichnen die zu den Matrixkomponenten gehörenden Exponenten q von x bzw. die entsprechenden Monome $x^q/\sqrt{q!}$ der Basis.

In der Ordnung der Basismonome, die ich in Kapitel 5 einführe und die der Blockstruktur des Laplace-Operators Rechnung trägt, wird der Laplace-Operator im Vektorraum der Polynome zweiten Grades folgendermaßen dargestellt:

$${}_{(0,0,0)} \begin{matrix} & (0,0,0) & (1,0,0) & (0,1,0) & (0,0,1) & (2,0,0) & (0,2,0) & (0,0,2) & (1,1,0) & (1,0,1) & (0,1,1) \\ (0,0,0) & \left(\begin{array}{cccccccccc} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right) \end{matrix}$$

2.9 Mehrfache Anwendung des Laplace-Operators

Satz 2.4. Sei $n \geq 1$ ganzzahlig. Die Elemente der Matrix Δ^n , die die n -fache Anwendung des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten darstellt, sind

$$(\Delta^n)_{pq} = \sum_{\substack{s \\ |s|=n}} \frac{n!}{s!} \sqrt{\frac{q!}{(q-2s)!}} \delta_{p,q-2s}$$

Die Summe enthält höchstens einen Summanden, da es zu gegebenen Multi-Indizes p und q höchstens einen Multi-Index s mit $|s| = n$ und $2s = q - p$ gibt.

Beweis. Nach Gleichung (2.9) lässt sich die n -malige Anwendung des Laplace-Operators als n -faches Produkt

$$\Delta^n = (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2)^n = (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2) \cdots (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2)$$

schreiben. Da Polynome m -ten Grades m -mal stetig differenzierbar sind, vertauschen ihre partiellen Ableitungen:

$$\partial_i \partial_j = \partial_j \partial_i \quad \text{für } i, j = 1, 2, 3$$

Laut Lemma 2.2 folgt unter Verwendung von $s_3 = n - s_1 - s_2$:

$$\begin{aligned}
 \Delta^n &= (\partial_1^2 + \partial_2^2 + \partial_3^2)^n \\
 &= \sum_{\substack{s_1, s_2, s_3 \\ |s|=n}} \frac{n!}{s_1! s_2! s_3!} \partial_1^{2s_1} \partial_2^{2s_2} \partial_3^{2s_3} \\
 &= \sum_{\substack{s_1, s_2, s_3 \\ |s|=n}} \frac{n!}{s_1! s_2! s_3!} \partial^{(2s_1, 2s_2, 2s_3)} \\
 &= \sum_{\substack{s \\ |s|=n}} \frac{n!}{s!} \partial^{2s}
 \end{aligned}$$

Nach Satz 2.3 sind die Matrixelemente $(\Delta^n)_{pq}$ der Matrix, die den Operator Δ^n im Vektorraum der Polynomkoeffizienten darstellt, gleich

$$(\Delta^n)_{pq} = \sum_{\substack{s \\ |s|=n}} \frac{n!}{s!} \sqrt{\frac{q!}{p!}} \delta_{p, q-2s} \tag{2.12}$$

Für gegebene Multi-Indizes p und q gibt es höchstens einen Multi-Index s mit $2s = q - p$ und $|s| = n$. Die Summe in Gleichung (2.12) enthält also höchstens einen Summanden.

□

3 Die Aufgabenstellung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist, die Moore-Penrose-Inverse des Laplace-Operators für beliebige Monomgrade m zu berechnen. Dafür muss seine Singulärwertzerlegung für beliebige Monomgrade m bekannt sein.

In diesem Kapitel entwickle ich die Grundlagen, die ich für die sukzessive Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators in Kapitel 4 benötige. Ich formuliere das Eigenwertproblem des Laplace-Operators und führe für das Folgende wichtige Notationen ein.

3.1 Die Moore-Penrose-Inverse für reelle Matrizen

Für jede komplexe Matrix M existiert ihre Moore-Penrose-Inverse M^\dagger , auch Pseudoinverse genannt (siehe [20]). Für die vorliegende Arbeit benötige ich die Moore-Penrose-Inverse nur für die reellen Matrizen, die den Laplace-Operator im Vektorraum der Polynomkoeffizienten darstellen, und beschränke mich daher auf die reelle Version der Definition der Moore-Penrose-Inversen. Die transponierte Matrix M^T ist durch das Skalarprodukt definiert (siehe Definition 2.4).

Definition 3.1. Moore-Penrose-Inverse für reelle Matrizen [20]

Sei M eine reelle $j \times k$ -Matrix. Dann existiert eine reelle $k \times j$ -Matrix M^\dagger mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned}MM^\dagger M &= M \\M^\dagger M M^\dagger &= M^\dagger\end{aligned}$$

M^\dagger ist eindeutig, wenn zusätzlich die Bedingungen

$$(MM^\dagger)^T = MM^\dagger \tag{3.1}$$

$$(M^\dagger M)^T = M^\dagger M \tag{3.2}$$

erfüllt sind. M^\dagger heißt Moore-Penrose-Inverse von M .

Wenn

$$M = U \Sigma V^T \quad (3.3)$$

die Singulärwertzerlegung von M ist (siehe Abschnitt 3.2), so ist die Moore-Penrose-Inverse von M gleich

$$M^\dagger = V \Sigma^\dagger U^T \quad (3.4)$$

Für diese Arbeit ist die folgende Aussage wichtig (siehe [20]):

Satz 3.1. *Wenn die Zeilen von M linear unabhängig sind, also MM^T invertierbar ist, kann M^\dagger durch*

$$M^\dagger = M^T (MM^T)^{-1} \quad (3.5)$$

berechnet werden. Da in diesem Fall

$$MM^\dagger = I_j$$

gilt, ist M^\dagger eine Rechtsinverse von M . I_j ist die j -dimensionale Einheitsmatrix.

3.2 Die Singulärwertzerlegung für reelle Matrizen

Für jede komplexe Matrix existiert eine Singulärwertzerlegung (siehe zum Beispiel [16, Abschnitt 6.7], [21]). Da ich sie in dieser Arbeit nur für die reellen Matrizen, die den Laplace-Operator im Vektorraum der Polynonkoeffizienten darstellen, benötige, formuliere und beweise ich in diesem Abschnitt die Singulärwertzerlegung für beliebige, aber reelle Matrizen.

Satz 3.2. *Singulärwertzerlegung für reelle Matrizen*

Für jede reelle $j \times k$ -Matrix M existiert eine Singulärwertzerlegung (singular value decomposition, SVD)

$$M = U \Sigma V^T \quad (3.6)$$

wobei U eine orthogonale $j \times j$ -Matrix und V eine orthogonale $k \times k$ -Matrix ist. Σ ist eine $j \times k$ -Matrix mit nicht-negativen Koeffizienten. Die Spaltenvektoren von U sind die orthonormalen Eigenvektoren der symmetrischen Matrix MM^T , und die Spaltenvektoren von V sind die orthonormalen Eigenvektoren der symmetrischen Matrix $M^T M$.

Beweis. Sei r der Rang der Matrix M und seien $\sigma_i^2, i = 1, \dots, r$, die von Null verschiedenen Eigenwerte der symmetrischen Matrizen MM^T und $M^T M$. Die σ_i heißen Singulärwerte von M .

Sei v_i mit $\|v_i\|^2 = v_i^T v_i = 1$ der Eigenvektor von $M^T M$ zum Eigenwert σ_i^2 :

$$M^T M v_i = \sigma_i^2 v_i \quad (3.7)$$

Dann ist $M v_i$ ein Eigenvektor von MM^T zum Eigenwert σ_i^2 :

$$MM^T M v_i = \sigma_i^2 M v_i \quad (3.8)$$

Aus

$$v_i^T M^T M v_i = \sigma_i^2 v_i^T v_i = \sigma_i^2$$

folgt:

$$\|M v_i\| = \sigma_i$$

Also ist $u_i = \frac{1}{\sigma_i} M v_i$ ein auf 1 normierter Eigenvektor von MM^T zum Eigenwert σ_i^2 .

Ordnet man also nun die Spaltenvektoren von U und V so, dass die $v_i, i = 1, \dots, r$, die ersten r Spalten von V und die $u_i, i = 1, \dots, r$, die ersten r Spalten von U sind, so folgt mit

$$\Sigma_{st} = \begin{cases} \sigma_i, & \text{falls } s = t = i \quad \text{und } 1 \leq i \leq r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

die Gleichung (3.6). □

Die Vektoren v_{r+1} bis v_k spannen den Nullraum von M auf, die Vektoren u_1 bis u_r spannen den Bildraum (Range) von M auf.

Σ^\dagger sei die $k \times j$ -Matrix mit

$$\Sigma_{st}^\dagger = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i}, & \text{falls } s = t = i \quad \text{und } 1 \leq i \leq r \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Damit ist die Moore-Penrose-Inverse M^\dagger von M durch

$$M^\dagger = V \Sigma^\dagger U^T$$

gegeben (vgl. z. B. [16, Abschnitt 7.4] und Abschnitt 3.1). Wenn V und Σ bekannt sind, etwa durch Lösung des Eigenwertproblems in Gleichung (3.7), folgt U aus

$$U = M V \Sigma^\dagger$$

Zusammenfassend gilt:

$$Mv_i = \begin{cases} \sigma_i u_i, & 1 \leq i \leq r \\ 0, & i > r \end{cases} \quad (3.9)$$

und

$$M^\dagger u_i = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_i} v_i, & 1 \leq i \leq r \\ 0, & i > r \end{cases} \quad (3.10)$$

Die u_i werden auch links-singuläre Vektoren von M genannt, die v_i rechts-singuläre Vektoren von M (siehe z. B. [6, section 2.4]).

3.3 Die Blockstruktur des Laplace-Operators bezüglich der Monomräume

Für $m \geq 2$ bildet der Laplace-Operator Monome m -ten Grades auf Monome $(m - 2)$ -ten Grades ab. Da der Vektorraum der Monome m -ten Grades

$$d_m = \frac{(m+1)(m+2)}{2} \quad (3.11)$$

Dimensionen hat (vgl. Gleichung (2.2)), ist die den Laplace-Operator auf dem Raum der Monome m -ten Grades darstellende Matrix $\Delta^{(m,m-2)}$ eine $d_{m-2} \times d_m$ -Matrix. Sie bildet Koeffizientenvektoren von Monomen m -ten Grades, $m \geq 2$, auf Koeffizientenvektoren von Monomen vom Grad $m - 2$ ab. Es gilt also:

$$\Delta^{(m,m-2)} : \mathbb{R}^{d_m} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_{m-2}}$$

Die Matrixelemente von $\Delta^{(m,m-2)}$ sind (vgl. Gleichung (2.11)):

$$\Delta_{pq}^{(m,m-2)} = \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} + \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \quad (3.12)$$

Hier gilt: $|q| = |p| + 2 = m \geq 2$.

Die Fälle $m = 0$ und $m = 1$ sind Spezialfälle, denn der Laplace-Operator bildet Monome nullten und ersten Grades auf Null ab. Die Kronecker-Deltas $\delta_{p,q-(2,0,0)}$ etc. in Gleichung (3.12) und damit die Matrixelemente der darstellenden Matrizen sind alle gleich Null. Der Raum der Monome nullten Grades hat eine Dimension, $d_0 = 1$. Die 1×1 -Matrix mit Element Null

$$\Delta^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdot \end{pmatrix}$$

stellt den Laplace-Operator auf dem Raum der Monome nullten Grades dar. Ein Punkt

. präsentiert einen Matrixkoeffizienten, der gleich Null ist.

Der Raum der Monome ersten Grades hat drei Dimensionen, $d_1 = 3$. Die Matrix, die den Laplace-Operator auf diesem Raum darstellt, ist

$$\Delta^{(1)} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} . & . & . \end{pmatrix}$$

Für die Matrix des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten für Polynome n -ten Grades ergibt sich also die folgende Block-Darstellung:

$$\Delta = \begin{pmatrix} \Delta^{(0)} & \Delta^{(1)} & \Delta^{(2,0)} & . & \dots & . & . \\ . & . & . & \Delta^{(3,1)} & \dots & . & . \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ . & . & . & . & \dots & \Delta^{(n-1,n-3)} & . \\ . & . & . & . & \dots & . & \Delta^{(n,n-2)} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Definition 3.2. Transponierte des Laplace-Operators für $m \geq 2$

Sei $a_q^{(m-2)} \in \mathbb{R}^{d_{m-2}}$ der Koeffizientenvektor eines Monoms $a^{(m-2)}$ vom Grad $m - 2$ und $b_q^{(m)} \in \mathbb{R}^{d_m}$ der Koeffizientenvektor eines Monoms $b^{(m)}$ vom Grad m . Dann ist die Transponierte $(\Delta^{(m,m-2)})^T$ von $(\Delta^{(m,m-2)})$

$$(\Delta^{(m,m-2)})^T : \mathbb{R}^{d_{m-2}} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_m}$$

durch das Skalarprodukt definiert (vgl. die Definition 2.3 und 2.4):

$$\begin{aligned} \left((\Delta^{(m,m-2)})^T a^{(m-2)} \right) \cdot b^{(m)} &= \left((\Delta^{(m,m-2)})^T a^{(m-2)} \right)^T b^{(m)} \\ &= \sum_q \sum_p (\Delta^{(m,m-2)})_{pq}^T a_q^{(m-2)} b_p^{(m)} \\ &= \sum_q \sum_p a_q^{(m-2)} (\Delta^{(m,m-2)})_{qp} b_p^{(m)} \\ &= (a^{(m-2)})^T \Delta^{(m,m-2)} b^{(m)} \\ &= a^{(m-2)} \cdot (\Delta^{(m,m-2)} b^{(m)}) \quad \forall a^{(m-2)} \in \mathbb{R}^{d_{m-2}}, b \in \mathbb{R}^{d_m} \end{aligned}$$

Außerdem gilt:

$$\Delta^T = \begin{pmatrix} (\Delta^{(0)})^T & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ (\Delta^{(1)})^T & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ (\Delta^{(2,0)})^T & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & (\Delta^{(3,1)})^T & \cdots & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdots & (\Delta^{(n-1,n-3)})^T & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & (\Delta^{(n,n-2)})^T \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

3.4 Die Darstellungen von $\Delta^T \Delta$ und $\Delta \Delta^T$

Das folgende Lemma impliziert, dass die Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten in jedem Monomraum separat berechnet werden kann.

Ich verwende die in Abschnitt 3.3 eingeführten Notationen. Insbesondere sind $\Delta^T \Delta$ und $\Delta \Delta^T$ durch Multiplikationen der Matrizen (3.13) und (3.14) gebildet. Es gilt:

$$\Delta^T \Delta = \begin{pmatrix} (\Delta^{(0)})^T \Delta^{(0)} & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & (\Delta^{(1)})^T \Delta^{(1)} & \cdots & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdots & (\Delta^{(n-1,n-3)})^T \Delta^{(n-1,n-3)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & (\Delta^{(n,n-2)})^T \Delta^{(n,n-2)} \end{pmatrix} \quad (3.15)$$

und

$$\Delta \Delta^T = \begin{pmatrix} \Delta^{(2,0)} (\Delta^{(2,0)})^T & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \Delta^{(3,1)} (\Delta^{(3,1)})^T & \cdots & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdots & \Delta^{(n-1,n-3)} (\Delta^{(n-1,n-3)})^T & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \Delta^{(n,n-2)} (\Delta^{(n,n-2)})^T \end{pmatrix} \quad (3.16)$$

Lemma 3.1. *Die Matrizen $\Delta^T \Delta$ und $\Delta \Delta^T$ sind reduzibel und können für jeden Monomgrad separat betrachtet werden.*

Beweis. Für $m \geq 2$ bildet der Operator $\Delta^T \Delta$ Monome m -ten Grades auf Monome m -ten Grades ab:

$$(\Delta^T \Delta)^{(m)} \doteq (\Delta^{(m,m-2)})^T \Delta^{(m,m-2)} : \mathbb{R}^{d_m} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_m}$$

Der Operator $\Delta \Delta^T$ bildet Monome $(m-2)$ -ten Grades auf Monome $(m-2)$ -ten Grades ab:

$$(\Delta \Delta^T)^{(m)} \doteq \Delta^{(m,m-2)} (\Delta^{(m,m-2)})^T : \mathbb{R}^{d_{m-2}} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_{m-2}}$$

Unter Verwendung der Notationen

$$(\Delta^T \Delta)^{(0)} \doteq (\Delta^{(0)})^T \Delta^{(0)} = \begin{pmatrix} \cdot \end{pmatrix} \quad (3.17)$$

$$(\Delta^T \Delta)^{(1)} \doteq (\Delta^{(1)})^T \Delta^{(1)} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (3.18)$$

$$(\Delta \Delta^T)^{(0)} \doteq \Delta^{(0)} (\Delta^{(0)})^T = \begin{pmatrix} \cdot \end{pmatrix}$$

$$(\Delta \Delta^T)^{(1)} \doteq \Delta^{(1)} (\Delta^{(1)})^T = \begin{pmatrix} \cdot \end{pmatrix}$$

lauten die Gleichungen (3.15) und (3.16):

$$\Delta^T \Delta = \begin{pmatrix} (\Delta^T \Delta)^{(0)} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & (\Delta^T \Delta)^{(1)} & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & (\Delta^T \Delta)^{(2)} & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & (\Delta^T \Delta)^{(3)} & \cdots & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & (\Delta^T \Delta)^{(n-1)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & (\Delta^T \Delta)^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.19)$$

und

$$\Delta \Delta^T = \begin{pmatrix} (\Delta \Delta^T)^{(2)} & \cdot & \cdots & \cdot & \cdot \\ \cdot & (\Delta \Delta^T)^{(3)} & \cdots & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \cdot & \cdot & \cdots & (\Delta \Delta^T)^{(n-1)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdots & \cdot & (\Delta \Delta^T)^{(n)} \end{pmatrix} \quad (3.20)$$

□

Sowohl Δ als auch $\Delta^T\Delta$ und $\Delta\Delta^T$ zerfallen also in Blöcke. Wie ich in Kapitel 5 zeige, zerfällt jeder dieser Blöcke wiederum in vier Unterblöcke.

3.5 Formulierung der Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators

Laut Satz 3.2 in Abschnitt 3.2 müssen für die Singulärwertzerlegung des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten die orthonormalen Eigenvektoren und die zugehörigen Eigenwerte von $\Delta^T\Delta$ und $\Delta\Delta^T$ berechnet werden. Wegen der Reduzibilität von $\Delta^T\Delta$ und $\Delta\Delta^T$ (vgl. die Gleichungen (3.19) und (3.20) in Lemma 3.1) bedeutet dies, dass für jeden Monomgrad m die Eigenvektoren und Eigenwerte von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ und von $(\Delta\Delta^T)^{(m)}$ berechnet werden müssen.

Folglich werden für jedes $m \geq 2$ Matrizen $U_{(m)}$, $\Sigma_{(m)}$ und $V_{(m)}$ gesucht, für die die Beziehung

$$\Delta^{(m,m-2)} = U_{(m)} \Sigma_{(m)} V_{(m)}^T \quad (3.21)$$

gilt (vgl. Gleichung 3.6). $U_{(m)}$ ist eine orthogonale $d_{m-2} \times d_{m-2}$ -Matrix. Ihre Spaltenvektoren sind die d_{m-2} Eigenvektoren von $(\Delta\Delta^T)^{(m)}$. Eigenvektoren zu gleichen Eigenwerten sind nicht automatisch paarweise orthogonal, können aber so gewählt werden. $\Sigma_{(m)}$ ist eine $d_{m-2} \times d_m$ -Matrix.

Die Spaltenvektoren der orthogonalen $d_m \times d_m$ -Matrix $V_{(m)}$ sind die Eigenvektoren von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$. Auch hier gilt, dass Eigenvektoren zu gleichen Eigenwerten nicht automatisch paarweise orthogonal sind, aber so gewählt werden können.

Für die sukzessive Berechnung der orthogonalen Spaltenvektoren von $V_{(m)}$, die ich in Kapitel 4 beweise, ist die Einführung einer Notation sinnvoll, die zwischen den Eigenvektoren zu Eigenwerten ungleich Null und denen zum Eigenwert Null unterscheidet.

Sei n_{E_m} die Anzahl der Eigenvektoren zu Eigenwerten $\sigma_i^2 \neq 0$ und n_{N_m} die Anzahl der Eigenvektoren zum Eigenwert Null. Es gilt:

$$n_{E_m} + n_{N_m} = d_m$$

$E_{(m)}$ sei die $d_m \times n_{E_m}$ -Matrix, deren Spaltenvektoren die n_{E_m} Eigenvektoren e_i^m von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ zu den Eigenwerten $\sigma_i^2 \neq 0$ sind, das heißt, es gilt:

$$(\Delta^T\Delta)^{(m)} e_i^m = \sigma_i^2 e_i^m, \quad 1 \leq i \leq n_{E_m} \quad (3.22)$$

(vgl. Gleichung (3.7)). Die n_{N_m} Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ zum Eigenwert Null bilden die Spaltenvektoren der $d_m \times n_{N_m}$ -Matrix $N_{(m)}$. Damit lässt sich $V_{(m)}$ als

$$V_{(m)} = \begin{pmatrix} E_{(m)} & N_{(m)} \end{pmatrix}$$

schreiben. Aus der Orthogonalität der Matrix $V_{(m)}$ (vgl. Abschnitt 3.2) folgt:

$$E_{(m)}^T E_{(m)} = I_{n_{E_m}} \quad (3.23)$$

$$N_{(m)}^T N_{(m)} = I_{n_{N_m}}$$

$$E_{(m)} E_{(m)}^T + N_{(m)} N_{(m)}^T = I_{d_m} \quad (3.24)$$

wobei I_n die n -dimensionale Einheitsmatrix bezeichnet.

Die Singulärwerte σ_i , $1 \leq i \leq n_{E_m}$, definieren die Diagonalmatrix $D_{(m)}$:

$$D_{(m)} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \dots & \cdot \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdot & \dots & \sigma_{n_{E_m}} \end{pmatrix}$$

$D_{(m)}$ ist invertierbar. Unter Verwendung von $E_{(m)}$ und $D_{(m)}$ lautet Gleichung (3.21):

$$\Delta^{(m,m-2)} = U_{(m)} D_{(m)} E_{(m)}^T \quad (3.25)$$

Mit Gleichung (3.23) folgt:

$$\Delta^{(m,m-2)} E_{(m)} = U_{(m)} D_{(m)}$$

und Gleichung (3.22) lässt sich als

$$(\Delta^T \Delta)^{(m)} E_{(m)} = E_{(m)} D_{(m)}^2 \quad (3.26)$$

schreiben.

Für die Monomgrade $m = 0$ und $m = 1$ gilt:

$$n_{E_0} = n_{E_1} = 0$$

und

$$\begin{aligned} U_{(0)} = U_{(1)} &= \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix} \\ V_{(0)} = N_{(0)} &= \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Als Orthonormalbasis im Raum der Monome ersten Grades wähle ich die Spaltenvektoren der Matrix

$$V_{(1)} = N_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \quad (3.28)$$

Gemäß Gleichung (3.8) ist $\Delta^{(m,m-2)} e_i^m$, $m \geq 2$, ein Eigenvektor von $(\Delta\Delta^T)^{(m)}$ zum Eigenwert σ_i^2 :

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)^{(m)} \Delta^{(m,m-2)} e_i^m &= \Delta^{(m,m-2)} (\Delta^{(m,m-2)})^T \Delta^{(m,m-2)} e_i^m \\ &= \Delta^{(m,m-2)} (\Delta^T \Delta)^{(m)} e_i^m \\ &= \sigma_i^2 \Delta^{(m,m-2)} e_i^m \end{aligned}$$

Diese Eigenschaft gilt für *beliebige* Matrizen. Die sukzessive Berechnung der Eigenvektoren e_i^m für steigenden Monomgrad m , die ich in Kapitel 4 beweise, beruht auf der Tatsache, dass im Falle des *Laplace-Operators* die Vektoren e_i^m auch Eigenvektoren von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ sind.

4 Sukzessive Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators

In diesem Kapitel beweise ich, dass sich das Eigenwertproblem für $(\Delta^T \Delta)^{(m+2)}$ lösen lässt, wenn seine Lösung für $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ bekannt ist.

Der Beweis erfolgt durch vollständige Induktion über m . Den Induktionsanfang bilden die Monomgrade $m = 0$ und $m = 1$ (siehe auch Abschnitt 3.4).

Ich verwende die Notationen, die ich in Kapitel 3, besonders in den Abschnitten 3.4 und 3.5, eingeführt habe.

4.1 Der Vergleich von $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$

Der folgende Satz 4.1 ist die zentrale Aussage dieser Arbeit.

Satz 4.1. Sei I_{d_m} die $d_m \times d_m$ -Einheitsmatrix und seien $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ wie in Abschnitt 3.4 definiert. Dann gilt für $m \geq 0$:

$$(\Delta \Delta^T)^{(m+2)} = (4m + 6) I_{d_m} + (\Delta^T \Delta)^{(m)}$$

Beweis. Für $m \geq 0$ hat der Laplace-Operator im Raum der Monome vom Grad $m + 2$ die folgende Darstellung:

$$\Delta_{st}^{(m+2,m)} = \sqrt{t_1(t_1 - 1)} \delta_{s,t-(2,0,0)} + \sqrt{t_2(t_2 - 1)} \delta_{s,t-(0,2,0)} + \sqrt{t_3(t_3 - 1)} \delta_{s,t-(0,0,2)} \quad (4.1)$$

und es gilt: $|t| = |s| + 2 = m + 2 \geq 2$ (siehe auch Gleichung (3.12)). Für die Darstellung von $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ folgt somit für $|r| = |q| = m$:

$$\begin{aligned} (\Delta \Delta^T)_{rq}^{(m+2)} &= \sum_{p, |p|=m+2} \Delta_{rp}^{(m+2,m)} (\Delta^{(m+2,m)})_{pq}^T \\ &= \sum_{p, |p|=m+2} \Delta_{rp}^{(m+2,m)} \Delta_{qp}^{(m+2,m)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{p, |p|=m+2} \left(\sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{r,p-(2,0,0)} + \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{r,p-(0,2,0)} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{r,p-(0,0,2)} \right) \times \left(\sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{q,p-(2,0,0)} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{q,p-(0,2,0)} + \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{q,p-(0,0,2)} \right) \\
&= \sum_{p, |p|=m+2} \left(\sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{r,p-(2,0,0)} \sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{q,p-(2,0,0)} \right. \\
&\quad + \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{r,p-(0,2,0)} \sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{q,p-(2,0,0)} \\
&\quad + \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{r,p-(0,0,2)} \sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{q,p-(2,0,0)} \\
&\quad + \sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{r,p-(2,0,0)} \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{q,p-(0,2,0)} \\
&\quad + \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{r,p-(0,2,0)} \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{q,p-(0,2,0)} \\
&\quad + \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{r,p-(0,0,2)} \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{q,p-(0,2,0)} \\
&\quad + \sqrt{p_1(p_1-1)} \delta_{r,p-(2,0,0)} \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{q,p-(0,0,2)} \\
&\quad + \sqrt{p_2(p_2-1)} \delta_{r,p-(0,2,0)} \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{q,p-(0,0,2)} \\
&\quad \left. + \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{r,p-(0,0,2)} \sqrt{p_3(p_3-1)} \delta_{q,p-(0,0,2)} \right)
\end{aligned}$$

Für eine stetige Funktion $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ und Multi-Indizes a und b gelten die Rechenregeln

$$\begin{aligned}
\sum_p \delta_{r,p-a} \delta_{q,p-b} &= \delta_{r+a,q+b} = \delta_{r,q+b-a} \\
\sum_p f(p) \delta_{r,p-a} &= f(r+a)
\end{aligned}$$

(vgl. Abschnitt 2.2 über das Kronecker-Delta in Multi-Index-Notation). Unter Verwendung dieser Regeln folgt:

$$\begin{aligned}
(\Delta \Delta^T)_{rq}^{(m+2)} &= ((r_1+2)(r_1+1) + (r_2+2)(r_2+1) + (r_3+2)(r_3+1)) \delta_{r,q} \\
&\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(2,-2,0)} \\
&\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(2,0,-2)} \\
&\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,2,0)} \\
&\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(0,2,-2)} \\
&\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,0,2)} \\
&\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(0,-2,2)}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Die Matrix-Elemente $(\Delta \Delta^T)_{rq}^{(m+2)}$ sind nur dann von Null verschieden, wenn r und q identisch sind oder sich durch $(2, -2, 0)$, $(2, 0, -2)$ oder $(0, 2, -2)$ unterscheiden.

Ich betrachte nun die Fälle $m = 0$, $m = 1$ und $m \geq 2$ gesondert.

Für $m = 0$ gilt $|r| = |q| = 0$ und $r = q = (0, 0, 0)$. Folglich reduziert sich Gleichung (4.2) auf

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)_{rq}^{(2)} &= ((r_1 + 2)(r_1 + 1) + (r_2 + 2)(r_2 + 1) + (r_3 + 2)(r_3 + 1)) \delta_{r,q} \\ &= (2 + 2 + 2) \delta_{r,q} \\ &= 6 \delta_{r,q} \end{aligned}$$

und die 1×1 -Matrix $(\Delta\Delta^T)^{(2)}$ hat als einziges Matrixelement 6. Mit $d_0 = 1$ und

$$(\Delta^T\Delta)^{(0)} = \left(\cdot \right)$$

(siehe Gleichung (3.17)) folgt die Behauptung für $m = 0$.

Für $m = 1$ gilt $|r| = |q| = 1$ und r und q nehmen die Werte $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ und $(0, 0, 1)$ an. Es ist also genau eine Komponente r_j , $j = 1, 2, 3$, des Multi-Index r gleich 1 und die anderen beiden gleich Null. Somit reduziert sich Gleichung (4.2) auf

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)_{rq}^{(3)} &= ((r_1 + 2)(r_1 + 1) + (r_2 + 2)(r_2 + 1) + (r_3 + 2)(r_3 + 1)) \delta_{r,q} \\ &= (3 \cdot 2 + 2 + 2) \delta_{r,q} \\ &= 10 \delta_{r,q} \end{aligned}$$

Anders gesagt, die 3×3 -Matrix $(\Delta\Delta^T)^{(3)}$ ist das Zehnfache der dreidimensionalen Einheitsmatrix I_3 . Mit $d_1 = 3$ und

$$(\Delta^T\Delta)^{(1)} = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

(siehe Gleichung (3.18)) folgt die Behauptung für $m = 1$:

$$(\Delta\Delta^T)^{(3)} = (4 + 6) I_{d_1} + (\Delta^T\Delta)^{(1)}$$

Für $m \geq 2$ berechne ich die Matrixelemente von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$, um sie mit denen von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ vergleichen zu können. Mit $|r| = |q| = m$ folgt unter Verwendung von Gleichung (4.1):

$$\begin{aligned} (\Delta^T\Delta)_{rq}^{(m)} &= \sum_{\substack{p \\ |p|=m-2}} (\Delta^{(m,m-2)})_{rp}^T \Delta_{pq}^{(m,m-2)} \\ &= \sum_{\substack{p \\ |p|=m-2}} \Delta_{pr}^{(m,m-2)} \Delta_{pq}^{(m,m-2)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\substack{p \\ |p|=m-2}} \left(\sqrt{r_1(r_1-1)} \delta_{p,r-(2,0,0)} + \sqrt{r_2(r_2-1)} \delta_{p,r-(0,2,0)} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{r_3(r_3-1)} \delta_{p,r-(0,0,2)} \right) \times \left(\sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} \right. \\
 &\quad \left. + \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \right)
 \end{aligned}$$

Man beachte, dass der Betrag des Index p hier gleich $|p| = m - 2$ ist, während in der Berechnung der Matrixelemente von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ $|p| = m + 2$ gilt. Ähnlich wie oben folgt:

$$\begin{aligned}
 (\Delta^T\Delta)_{rq}^{(m)} &= \sum_{\substack{p \\ |p|=m-2}} \left(\sqrt{r_1(r_1-1)} \delta_{p,r-(2,0,0)} \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} \right. \\
 &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)} \delta_{p,r-(2,0,0)} \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)} \delta_{p,r-(2,0,0)} \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \\
 &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)} \delta_{p,r-(0,2,0)} \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)} \delta_{p,r-(0,2,0)} \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)} \delta_{p,r-(0,2,0)} \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \\
 &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)} \delta_{p,r-(0,0,2)} \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)} \delta_{p,r-(0,0,2)} \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} \\
 &\quad \left. + \sqrt{r_3(r_3-1)} \delta_{p,r-(0,0,2)} \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p,q-(0,0,2)} \right) \\
 &= r_1(r_1-1) \delta_{r,q} + r_2(r_2-1) \delta_{r,q} + r_3(r_3-1) \delta_{r,q} \\
 &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(2,-2,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(2,0,-2)} \\
 &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,2,0)} \\
 &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(0,2,-2)} \\
 &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,0,2)} \\
 &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(0,-2,2)}
 \end{aligned} \tag{4.3}$$

Die Matrix-Elemente $(\Delta^T\Delta)_{rq}^{(m)}$ sind also wie $(\Delta\Delta^T)_{rq}^{(m+2)}$ nur dann von Null verschieden, wenn r und q identisch sind oder sich durch $(2, -2, 0)$, $(2, 0, -2)$ oder $(0, 2, -2)$ unterscheiden.

Der Vergleich der Gleichungen (4.2) und (4.3) führt auf

$$\begin{aligned}
 (\Delta\Delta^T)_{rq}^{(m+2)} - (\Delta^T\Delta)_{rq}^{(m)} &= ((r_1+2)(r_1+1) - r_1(r_1-1) \\
 &\quad + (r_2+2)(r_2+1) - r_2(r_2-1) \\
 &\quad + (r_3+2)(r_3+1) - r_3(r_3-1)) \delta_{r,q}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= (4(r_1 + r_2 + r_3) + 6) \delta_{r,q} \\ &= (4m + 6) \delta_{r,q} \end{aligned}$$

wobei $r_1 + r_2 + r_3 = |r| = m$ verwendet wurde. Da $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ $d_m \times d_m$ -Matrizen sind, folgt die Behauptung:

$$(\Delta\Delta^T)^{(m+2)} = (4m + 6) I_{d_m} + (\Delta^T\Delta)^{(m)}$$

□

4.2 Die Singulärwerte und die links-singulären Vektoren des Laplace-Operators

Die folgende Aussage folgt direkt aus Satz 4.1.

Korollar 4.1. *Gemeinsame Eigenvektoren von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$*

Für $m \geq 0$ sei e ein Eigenvektor von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ zum Eigenwert λ . Dann ist e ein Eigenvektor von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ zum Eigenwert $4m + 6 + \lambda$.

Beweis. Für jeden Eigenvektor e von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ zum Eigenwert λ folgt aus Satz 4.1:

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)^{(m+2)} e &= (4m + 6) e + (\Delta^T\Delta)^{(m)} e \\ &= (4m + 6 + \lambda) e \end{aligned}$$

Also ist e ein Eigenvektor von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ zum Eigenwert $4m + 6 + \lambda$. □

Sei $0_n = 0 I_n$ die $n \times n$ -Matrix, deren Elemente sämtlich gleich Null sind. Dann sind die Diagonalelemente der $d_m \times d_m$ -Matrix

$$\begin{pmatrix} D_{(m)}^2 & \cdot \\ \cdot & 0_{n_{N_m}} \end{pmatrix}$$

die n_{E_m} von Null verschiedenen Eigenwerte von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ und ihre n_{N_m} Eigenwerte Null (siehe Abschnitt 3.5). Die folgenden Aussagen ergeben sich unmittelbar aus Korollar 4.1:

Korollar 4.2. *Singulärwerte und links-singulären Vektoren von $\Delta^{(m+2,m)}$*

Es sei $m \geq 0$.

(a) Es gilt:

$$D_{(m+2)}^2 = (4m + 6) I_{d_m} + \begin{pmatrix} D_{(m)}^2 & \cdot \\ \cdot & 0_{n_{N_m}} \end{pmatrix}$$

(b) $D_{(m+2)}$ ist invertierbar.

(c) Die Anzahl der Singulärwerte von $\Delta^{(m+2,m)}$ ist

$$n_{E_{m+2}} = d_m = \frac{(m+1)(m+2)}{2}$$

(d) Die Anzahl der Eigenwerte Null von $(\Delta^T \Delta)^{(m+2)}$ ist

$$n_{N_{m+2}} = d_{m+2} - d_m = 2(m+2) + 1$$

Die zugehörigen $2(m+2) + 1$ Eigenvektoren sind nicht eindeutig bestimmbar.

(e) Die $d_m \times d_m$ -Matrix $U_{(m+2)}$, deren Spaltenvektoren die links-singulären Vektoren von $\Delta^{(m+2,m)}$ sind, kann zu

$$U_{(m+2)} = V_{(m)}$$

gewählt werden, ist aber nur bis auf orthogonale Transformationen in den Eigenräumen eindeutig bestimmt. Mit $V_{(m)}$ ist auch $U_{(m+2)}$ eine orthogonale $d_m \times d_m$ -Matrix.

(f) Es gilt:

$$(\Delta \Delta^T)^{(m+2)} U_{(m+2)} = U_{(m+2)} D_{(m+2)}^2$$

Insbesondere ist $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ invertierbar:

$$\left((\Delta \Delta^T)^{(m+2)} \right)^{-1} = U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T$$

(g) Es gilt:

$$\Sigma_{(m+2)} = \begin{pmatrix} D_{(m+2)} & 0_{n_{N_{m+2}}} \end{pmatrix}$$

Beweis. Die d_m Diagonalelemente der Matrix

$$\begin{pmatrix} D_{(m)}^2 & \cdot \\ \cdot & 0_{n_{N_m}} \end{pmatrix}$$

sind die d_m Eigenwerte der Matrix $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$. Sie sind nicht-negativ. Laut Korollar 4.1

sind alle d_m Diagonalelemente der Diagonalmatrix

$$(4m + 6)I_{d_m} + \begin{pmatrix} D_{(m)}^2 & \cdot \\ \cdot & 0_{n_{N_m}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (4m + 6)I_{n_{E_m}} + D_{(m)}^2 & \cdot \\ \cdot & (4m + 6)I_{n_{N_m}} \end{pmatrix}$$

Eigenwerte von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$. Sie sind sämtlich positiv. Da $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ eine $d_m \times d_m$ -Matrix ist, kann sie keine weiteren Eigenwerte haben. Insbesondere kann sie keine Eigenwerte Null haben.

Die $d_{m+2} \times d_{m+2}$ -Matrix $(\Delta^T\Delta)^{(m+2)}$ und die Matrix $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ haben dieselben von Null verschiedenen Eigenwerte und die Anzahl $n_{E_{m+2}}$ dieser von Null verschiedenen Eigenwerte ist gleich der Anzahl der Singulärwerte von $\Delta^{(m+2,m)}$ (siehe Abschnitt 3.2), also gilt $n_{E_{m+2}} = d_m$. Damit sind die Aussagen (a), (b) und (c) bewiesen.

Mit

$$n_{E_{m+2}} + n_{N_{m+2}} = d_{m+2}$$

und

$$d_{m+2} - d_m = \frac{1}{2}(m+3)(m+4) - \frac{1}{2}(m+1)(m+2) = 2m+5 = 2(m+2) + 1$$

folgt Aussage (d).

Die d_m Spaltenvektoren von $V_{(m)}$ sind die Eigenvektoren von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ (siehe Abschnitt 3.5). Laut Korollar 4.1 sind sie auch die Eigenvektoren von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ und somit als links-singuläre Vektoren von $\Delta^{(m+2,m)}$ die Spaltenvektoren der $d_m \times d_m$ -Matrix $U_{(m+2)}$.

Diese Wahl ist nicht eindeutig, denn wenn e_1 und e_2 zwei Eigenvektoren von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ zum Eigenwert λ sind, ist jede Linearkombination

$$c_1 e_1 + c_2 e_2$$

mit reellen Zahlen $c_1 \neq 0$ und $c_2 \neq 0$ ebenfalls ein Eigenvektor von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ zum Eigenwert λ und folglich auch ein Eigenvektor von $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$. Damit ist auch (e) bewiesen.

Die Aussage (f) ist lediglich eine andere Schreibweise von Korollar 4.1. Da $U_{(m+2)}$ orthogonal ist, gilt:

$$(\Delta\Delta^T)^{(m+2)} = U_{(m+2)} D_{(m+2)}^2 U_{(m+2)}^T$$

und folglich

$$\left((\Delta\Delta^T)^{(m+2)} \right)^{-1} = U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T$$

Da $\Sigma_{(m+2)}$ eine $d_m \times d_{m+2}$ -Matrix ist (siehe Abschnitt 3.5), folgt Aussage (g) aus den Aussagen (a) bis (d). \square

4.3 Die rechts-singulären Vektoren und die Moore-Penrose-Inverse

Im vorherigen Abschnitt 4.2 habe ich gezeigt, wie sich $U_{(m+2)}$, $D_{(m+2)}$ und $\Sigma_{(m+2)}$ aus $V_{(m)}$ und $D_{(m)}$ berechnen lassen. Nun zeige ich, wie sich daraus $V_{(m+2)}$ und $(\Delta^{(m+2)})^\dagger$ ergeben. Damit ist das Eigenwertproblem des Laplace-Operators im Raum der Monome vom Grad $m+2$ gelöst, wenn es zuvor im Raum der Monome vom Grad m gelöst worden ist.

Der folgende Satz ist ein Spezialfall der Aussage, dass M^\dagger aus M^T berechnet werden kann, wenn die zugehörige Matrix U sowie die Singulärwerte von M bekannt sind (siehe Bemerkung 4.1 im Anschluss an den Beweis des Satzes).

Satz 4.2. Berechnung von $(\Delta^{(m+2)})^\dagger$ und $E_{(m+2)}$

Es gelte $m \geq 0$. Mit $D_{(m+2)}$ und $U_{(m+2)}$ nach Korollar 4.2 (a) und (e) gilt:

$$\begin{aligned} (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger &= (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T \\ E_{(m+2)} &= (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} \\ \Delta^{(m+2,m)} E_{(m+2)} &= U_{(m+2)} D_{(m+2)} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Beweis. Die Moore-Penrose-Inverse M^\dagger einer Matrix M mit Singulärwertzerlegung

$$M = U \Sigma V^T$$

ist nach den Gleichungen (3.3) und (3.5) durch

$$M^\dagger = V \Sigma^\dagger U^T$$

gegeben. Nach Gleichung (3.21)

$$\Delta^{(m+2,m)} = U_{(m+2)} \Sigma_{(m+2)} V_{(m+2)}^T$$

sind also die Matrizen $(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger$ mit

$$(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger = V_{(m+2)} \Sigma_{(m+2)}^\dagger U_{(m+2)}^T \quad (4.5)$$

und $E_{(m+2)}$ gesucht, wobei $E_{(m+2)}$ durch

$$V_{(m+2)} = \begin{pmatrix} E_{(m+2)} & N_{(m+2)} \end{pmatrix}$$

definiert ist. $E_{(m+2)}$ ist laut Korollar 4.2 (c) eine $d_{m+2} \times d_m$ -Matrix mit $n_{E_{m+2}} = d_m$ Spalten.

Da $D_{(m+2)}$ nach Korollar 4.2 (b) invertierbar ist, folgt mit

$$\Sigma_{(m+2)} = \begin{pmatrix} D_{(m+2)} & 0_{n_{N_{m+2}}} \end{pmatrix}$$

(siehe Korollar 4.2 (g)) und der Definition von Σ^\dagger in Abschnitt 3.2, dass

$$\Sigma_{(m+2)}^\dagger = \begin{pmatrix} D_{(m+2)}^{-1} \\ 0_{n_{N_{m+2}}} \end{pmatrix}$$

gilt. Somit ergibt sich aus Gleichung (4.5) die folgende Darstellung für $(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger$:

$$\begin{aligned} (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger &= \begin{pmatrix} E_{(m+2)} & N_{(m+2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{(m+2)}^{-1} \\ 0_{n_{N_{m+2}}} \end{pmatrix} U_{(m+2)}^\top \\ &= E_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^\top \end{aligned} \quad (4.6)$$

Aus

$$\Delta^{(m+2,m)} = U_{(m+2)} D_{(m+2)} E_{(m+2)}^\top \quad (4.7)$$

(vgl. Gleichung (3.25)) folgt außerdem:

$$(\Delta^{(m+2,m)})^\top = E_{(m+2)} D_{(m+2)} U_{(m+2)}^\top \quad (4.8)$$

Da $U_{(m+2)}$ orthogonal ist, unterscheiden sich die Matrizen $(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger$ und $(\Delta^{(m+2,m)})^\top$ also nur durch den Faktor $UD^{-2}U^\top$:

$$\begin{aligned} (\Delta^{(m+2,m)})^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^\top &= E_{(m+2)} D_{(m+2)} U_{(m+2)}^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^\top \\ &= E_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^\top \\ &= (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger \end{aligned}$$

$(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger$ kann auf diese Weise berechnet werden, da $(\Delta^{(m+2,m)})^\top$, $U_{(m+2)}$ und $D_{(m+2)}^{-2}$ nach Voraussetzung bekannt sind. Die Matrix $E_{(m+2)}$ folgt laut Gleichung (4.6) zu

$$\begin{aligned} E_{(m+2)} &= (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger U_{(m+2)} D_{(m+2)} \\ &= (\Delta^{(m+2,m)})^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} \end{aligned}$$

Diese Darstellung von $E_{(m+2)}$ ergibt sich auch direkt aus Gleichung (4.7).

Unter Verwendung des Korollars 4.2 (f) ist ersichtlich, dass die Spaltenvektoren von $E_{(m+2)}$ orthonormiert sind:

$$\begin{aligned} E_{(m+2)}^T E_{(m+2)} &= D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^T \Delta^{(m+2,m)} (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} \\ &= D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^2 D_{(m+2)}^{-1} \\ &= I_{d_m} \end{aligned}$$

(vgl. Gleichung (3.23) und Korollar 4.2 (c)). Außerdem folgt aus Korollar 4.2 (f):

$$\begin{aligned} \Delta^{(m+2,m)} E_{(m+2)} &= \Delta^{(m+2,m)} (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} \\ &= U_{(m+2)} D_{(m+2)} \end{aligned}$$

Dasselbe Ergebnis erhält man mit Berücksichtigung der Orthogonalität der Spaltenvektoren von $E_{(m+2)}$ auch direkt aus Gleichung (4.7). \square

Bemerkung 4.1. Die Darstellung

$$(\Delta^{(m+2,m)})^\dagger = (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T$$

für $m \geq 0$ (siehe Gleichung (4.4) im Satz 4.2) folgt mit

$$\left((\Delta \Delta^T)^{(m+2)} \right)^{-1} = U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T$$

aus Korollar 4.2 (f) auch direkt aus Gleichung (3.5) in Satz 3.1:

$$M^\dagger = M^T (M M^T)^{-1}$$

Außerdem sind

$$\begin{aligned} \Delta^{(m+2,m)} (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger &= \Delta^{(m+2,m)} (\Delta^{(m+2,m)})^T U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T \\ &= (\Delta \Delta^T)^{(m+2)} U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T \\ &= U_{(m+2)} D_{(m+2)}^2 D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^T \\ &= U_{(m+2)} U_{(m+2)}^T \\ &= I_{d_m} \end{aligned}$$

und mit den Gleichungen (4.7) und (4.8) auch

$$\begin{aligned}
 (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger \Delta^{(m+2,m)} &= (\Delta^{(m+2,m)})^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^\top \Delta^{(m+2,m)} \\
 &= E_{(m+2)} D_{(m+2)} U_{(m+2)}^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-2} U_{(m+2)}^\top \Delta^{(m+2,m)} \\
 &= E_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^\top \Delta^{(m+2,m)} \\
 &= E_{(m+2)} D_{(m+2)}^{-1} U_{(m+2)}^\top U_{(m+2)} D_{(m+2)} E_{(m+2)}^\top \\
 &= E_{(m+2)} E_{(m+2)}^\top
 \end{aligned}$$

symmetrische Matrizen. Somit sind die beiden Bedingungen (3.1) und (3.2) für die Eindeutigkeit der Moore-Penrose-Inversen erfüllt.

$E_{(m+2)} E_{(m+2)}^\top$ ist die symmetrische Projektion auf den Unterraum, der von den Spaltenvektoren von $E_{(m+2)}$ aufgespannt wird (vgl. Gleichung (3.24)).

Bemerkung 4.2. $N_{(m+2)}$ kann bestimmt werden, indem man die Spaltenvektoren von $E_{(m+2)}$ zu einer Orthonormalbasis des Vektorraums der Monome vom Grad $m+2$ ergänzt.

Sei beispielsweise e der Koeffizientenvektor eines Monoms vom Grad $m+2$ mit

$$\Delta^{(m+2,m)} e \neq 0$$

Setze

$$\begin{aligned}
 \hat{e} &= e - (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger \Delta^{(m+2,m)} e \\
 &= e - E_{(m+2)} E_{(m+2)}^\top e \\
 &= N_{(m+2)} N_{(m+2)}^\top e
 \end{aligned}$$

$N_{(m+2)} N_{(m+2)}^\top$ ist die symmetrische Projektion auf den Unterraum, der von den Spaltenvektoren von $N_{(m+2)}$ aufgespannt wird (vgl. Gleichung (3.24)). Es gilt:

$$\Delta^{(m+2,m)} \hat{e} = 0$$

Weitere Möglichkeiten zur Bestimmung von $N_{(m+2)}$ skizziere ich im Abschnitt 6.4 im Zusammenhang mit den Kugelflächenfunktionen.

4.4 Beispiele: $m = 0$ und $m = 1$

Die Sätze und Korollare der Abschnitte 4.1 bis 4.3 veranschauliche ich in diesem Abschnitt anhand der Beispiele $m = 0$ und $m = 1$. Dabei verwende ich in Abschnitt 3.5 eingeführte

Notationen.

Im Raum der Monome nullten Grades, $m = 0$, hat der Laplace-Operator einen Eigenwert Null: $n_{N_0} = d_0 = 1$. Der zugehörige Eigenvektor führt auf

$$V_{(0)} = N_{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \end{pmatrix}$$

(siehe Gleichung (3.27)). Laut Korollar 4.2 gilt:

$$\begin{aligned} D_{(2)} &= \left(\sqrt{6} \right) \\ n_{E_2} &= d_0 = 1 \\ n_{N_2} &= d_2 - d_0 = \frac{3 \cdot 4}{2} - \frac{1 \cdot 2}{2} = 5 \\ U_{(2)} &= V_{(0)} \end{aligned}$$

Der Laplace-Operator $\Delta^{(2,0)}$ wird durch die Matrix

$$\Delta^{(2,0)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (2,0,0) & (0,2,0) & (0,0,2) & (1,1,0) & (1,0,1) & (0,1,1) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (0,0,0) \end{matrix} & \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \end{matrix}$$

dargestellt. Die Multi-Indizes (q_1, q_2, q_3) links von der ersten Spalte und oberhalb der ersten Zeile bezeichnen die Exponenten q der Basismonome $x^q / \sqrt{q!}$ der zugehörigen Komponenten der Matrix. Die gewählte Reihenfolge der Basismonome erläutere ich in Kapitel 5. Komponenten gleich Null werden durch einen Punkt \cdot dargestellt.

Laut Satz 4.2 gilt:

$$E_{(2)} = (\Delta^{(2,0)})^T U_{(2)} D_{(2)}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Die $n_{N_2} = 5$ Eigenvektoren zum Eigenwert Null können zu

$$N_{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

gewählt werden. Die Gründe für diese spezielle Wahl werden in Kapitel 6 über die Kugelflächenfunktionen deutlich. Außerdem gilt:

$$\Delta^{(2,0)} E_{(2)} = U_{(2)} D_{(2)} = \sqrt{6}$$

Im Raum der Monome ersten Grades, $m = 1$, hat der Laplace-Operator drei Eigenwerte Null: $n_{N_1} = d_1 = 3$. Die zugehörigen Eigenvektoren können als Spaltenvektoren der dreidimensionalen Einheitsmatrix

$$V_{(1)} = N_{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

gewählt werden (vgl. Gleichung (3.28)). Korollar 4.2 besagt, dass

$$\begin{aligned} D_{(3)} &= \begin{pmatrix} \sqrt{10} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sqrt{10} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{10} \end{pmatrix} \\ n_{E_3} &= d_1 = 3 \\ n_{N_3} &= d_3 - d_1 = \frac{4 \cdot 5}{2} - \frac{2 \cdot 3}{2} = 7 \\ U_{(3)} &= V_{(1)} \end{aligned}$$

gilt. Der Laplace-Operator $\Delta^{(3,1)}$ wird durch die 3×10 -Matrix

$$\Delta^{(3,1)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (3,0,0) & (1,2,0) & (1,0,2) & (2,1,0) & (0,3,0) & (0,1,2) & (2,0,1) & (0,2,1) & (0,0,3) & (1,1,1) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (1,0,0) \\ (0,1,0) \\ (0,0,1) \end{matrix} & \begin{pmatrix} \sqrt{6} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \cdot \end{pmatrix} \end{matrix}$$

dargestellt. Durch die Wahl der Reihenfolge $(3, 0, 0), (1, 2, 0), \dots, (1, 1, 1)$ der Basis-

monome zerfällt $\Delta^{(3,1)}$ in Blöcke (siehe Kapitel 5). Laut Satz 4.2 gilt:

$$E_{(3)} = (\Delta^{(3,1)})^T U_{(3)} D_{(3)}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Ferner gilt:

$$\Delta^{(3,1)} E_{(3)} = U_{(3)} D_{(3)} = \begin{pmatrix} \sqrt{10} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sqrt{10} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{10} \end{pmatrix}$$

Die sieben Eigenvektoren zum Eigenwert Null, die die Spalten der 10×7 -Matrix $N_{(3)}$ bilden, können als

$$N_{(3)} = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \cdot & -2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

gewählt werden.

4.5 Die Singulärwerte und singulären Vektoren für beliebige Monomgrade

Die Sätze und Korollare der Abschnitte 4.1 bis 4.3 ermöglichen die Berechnung der Singulärwerte und der singulären Vektoren des Laplace-Operators für beliebige Monomgrade m .

Satz 4.3. *Sei $m_0 \geq 0$ und sei $k \geq 1$ ganzzahlig. Dann ist jeder der $n_{N_{m_0}} = 2m_0 + 1$ Spaltenvektoren der Matrix*

$$\left(\Delta^{(m_0+2k, m_0+2k-2)}\right)^T \dots \left(\Delta^{(m_0+4, m_0+2)}\right)^T \left(\Delta^{(m_0+2, m_0)}\right)^T N_{(m_0)} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,1}}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,2}}} \dots \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,k}}}$$

ein Eigenvektor von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2k)}$ zum Eigenwert $\lambda_{m_0,k}$. Die zugehörigen Singulärwerte von $\Delta^{(m_0+2k, m_0+2k-2)}$ sind die $\sqrt{\lambda_{m_0,k}}$. Dabei sind die Werte $\lambda_{m_0,h}$ für $1 \leq h \leq k$ durch

$$\lambda_{m_0,h} = 2h(2(m_0 + h) + 1)$$

definiert.

Beweis. Die Matrix $(\Delta^T \Delta)^{(m_0)}$ hat nach Korollar 4.2 (d) $n_{N_{m_0}} = 2m_0 + 1$ Eigenvektoren zum Eigenwert Null. Sie bilden die Spalten der Matrix $N_{(m_0)}$. Laut Korollar 4.2 (e) gilt:

$$U_{(m_0+2)} = V_{(m_0)} = \left(E_{(m_0)} N_{(m_0)}\right)$$

Aus $U_{(m_0+2)}$ ergeben sich laut Satz 4.2 die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2)}$ zu von Null verschiedenen Eigenwerten durch

$$E_{(m_0+2)} = \left(\Delta^{(m_0+2, m_0)}\right)^T U_{(m_0+2)} D_{(m_0+2)}^{-1} = \left(\Delta^{(m_0+2, m_0)}\right)^T \left(E_{(m_0)} N_{(m_0)}\right) D_{(m_0+2)}^{-1} \quad (4.14)$$

Für die Matrix $D_{(m_0+2)}$ folgt nach Korollar 4.2 (a)

$$D_{(m_0+2)}^2 = (4m_0 + 6) I_{d_{m_0}} + \begin{pmatrix} D_{(m_0)}^2 & \cdot \\ \cdot & 0_{n_{N_{m_0}}} \end{pmatrix}$$

Beschränkt man in Gleichung (4.14) die Anwendung von $(\Delta^{(m_0+2, m_0)})^T$ auf $N_{(m_0)}$, so erhält man folglich

$$\left(\Delta^{(m_0+2, m_0)}\right)^T N_{(m_0)} \frac{1}{\sqrt{4m_0 + 6}} \quad (4.15)$$

Die $n_{N_{m_0}} = 2m_0 + 1$ Spaltenvektoren dieser Matrix sind Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2)}$

zum Eigenwert

$$\lambda_{m_0,1} \doteq 4m_0 + 6 \quad (4.16)$$

Die Multiplikation der Matrix in Gleichung (4.15) von links mit $(\Delta^{(m_0+4,m_0+2)})^T$ ergibt $n_{N_{m_0}}$ Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+4)}$:

$$(\Delta^{(m_0+4,m_0+2)})^T (\Delta^{(m_0+2,m_0)})^T N_{(m_0)} \frac{1}{\sqrt{4m_0+6}} \frac{1}{\sqrt{4(2(m_0+2)+1)}} \quad (4.17)$$

Nach Korollar 4.2 (a) haben sie den Eigenwert

$$\lambda_{m_0,2} \doteq 4m_0 + 6 + 4(m_0 + 2) + 6 = 8m_0 + 20 = 4(2(m_0 + 2) + 1)$$

Der Faktor $\lambda_{m_0,2}^{-1/2} = 1/\sqrt{4(2(m_0+2)+1)}$ in Gleichung (4.17) sind die zugehörigen, identischen Matrixelemente von $D_{(m_0+4)}^{-1}$.

Die k -malige Multiplikation mit Δ^T ergibt, dass die $n_{N_{m_0}}$ Spaltenvektoren der Matrix

$$(\Delta^{(m_0+2k,m_0+2k-2)})^T \dots (\Delta^{(m_0+4,m_0+2)})^T (\Delta^{(m_0+2,m_0)})^T N_{(m_0)} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,1}}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,2}}} \dots \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,k}}}$$

$n_{N_{m_0}}$ Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2k)}$ zum selben Eigenwert $\lambda_{m_0,k}$ sind. Dabei gilt für $1 \leq h \leq k$:

$$\lambda_{m_0,h} = 2h(2(m_0 + h) + 1)$$

Diese Aussage beweise ich durch Induktion über h . Für $h = 1$ gilt (Induktionsanfang):

$$\lambda_{m_0,1} = 2(2(m_0 + 1) + 1) = 4m_0 + 6$$

in Übereinstimmung mit Gleichung (4.16). Die Aussage gelte nun für $1 \leq h$, das heißt

$$\lambda_{m_0,h} = 2h(2(m_0 + h) + 1)$$

ist der zu $N_{(m_0)}$ gehörende Eigenwert von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2h)}$. Zu zeigen ist also, dass

$$\lambda_{m_0,h+1} = 2(h+1)(2(m_0 + h+1) + 1)$$

der entsprechende Eigenwert von $(\Delta^T \Delta)^{(m_0+2h+2)}$ ist (Induktionsschritt).

Laut Satz 4.1 ist

$$4(m_0 + 2h) + 6 + \lambda_{m_0,h}$$

Eigenwert von $(\Delta\Delta^T)^{(m_0+2h+2)}$ und damit auch von $(\Delta^T\Delta)^{(m_0+2h+2)}$. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 4(m_0 + 2h) + 6 + \lambda_{m_0,h} &= 4(m_0 + 2h) + 6 + 2h(2(m_0 + h) + 1) \\
 &= 4h + 4 + 2(2m_0 + 2h + 1) + 2h(2m_0 + 2h + 1) \\
 &= 4(h + 1) + 2(h + 1)(2m_0 + 2h + 1) \\
 &= 2(h + 1)(2m_0 + 2h + 2 + 1) \\
 &= \lambda_{m_0,h+1}
 \end{aligned}$$

□

Bemerkung 4.3. zu Satz 4.3.

Das Produkt der Faktoren $\sqrt{\lambda_{m_0,h}}$, $1 \leq h \leq k$, lässt sich umschreiben:

$$\begin{aligned}
 &\sqrt{\lambda_{m_0,1}} \sqrt{\lambda_{m_0,2}} \cdots \sqrt{\lambda_{m_0,k}} \\
 &= \sqrt{2(2(m_0 + 1) + 1)} \sqrt{4(2(m_0 + 2) + 1)} \cdots \sqrt{2k(2(m_0 + k) + 1)} \\
 &= \sqrt{2^k k!} \sqrt{2(m_0 + 1) + 1} \sqrt{2(m_0 + 2) + 1} \cdots \sqrt{2(m_0 + k) + 1}
 \end{aligned}$$

Die Matrixelemente der Matrix

$$\begin{aligned}
 &(\Delta^{(m_0+2k,m_0+2k-2)})^T \cdots (\Delta^{(m_0+4,m_0+2)})^T (\Delta^{(m_0+2,m_0)})^T \\
 &= (\Delta^{(m_0+2,m_0)} \Delta^{(m_0+4,m_0+2)} \cdots \Delta^{(m_0+2k,m_0+2k-2)})^T \\
 &= (\Delta^k)^T
 \end{aligned}$$

sind laut Satz 2.4 durch

$$(\Delta^k)_{pq} = \sum_{\substack{s \\ |s|=k}} \frac{k!}{s!} \sqrt{\frac{q!}{(q-2s)!}} \delta_{p,q-2s}$$

mit $|q| = m_0 + 2k$ und $|p| = m_0$ gegeben. Die Multiplikation der Matrixelemente mit den Faktoren $1/\sqrt{\lambda_{m_0,h}}$, $1 \leq h \leq k$, ergibt:

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,1}}} \cdots \frac{1}{\sqrt{\lambda_{m_0,k}}} \left((\Delta^{(m_0+2k,m_0+2k-2)})^T \cdots (\Delta^{(m_0+2,m_0)})^T \right)_{qp} \\
 &= \sum_{\substack{s \\ |s|=k}} \frac{1}{\sqrt{2^k k!}} \frac{1}{\sqrt{2(m_0 + 1) + 1}} \cdots \frac{1}{\sqrt{2(m_0 + k) + 1}} \frac{k!}{s!} \sqrt{\frac{q!}{(q-2s)!}} \delta_{p,q-2s} \\
 &= \frac{\sqrt{k!}}{\sqrt{2^k}} \frac{1}{\sqrt{2(m_0 + 1) + 1}} \cdots \frac{1}{\sqrt{2(m_0 + k) + 1}} \sum_{\substack{s \\ |s|=k}} \frac{1}{s!} \sqrt{\frac{q!}{(q-2s)!}} \delta_{p,q-2s}
 \end{aligned}$$

Die numerische Berechnung dieser Ausdrücke, besonders für große Werte k , stellt aufgrund der begrenzten numerischen Genauigkeit eine gewisse Herausforderung dar.

Mit Hilfe des Satzes 4.3 lassen sich für beliebigen Monomgrad m alle Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ und ihre Vielfachheiten ν berechnen.

Es bezeichne $\lfloor m/2 \rfloor$ die größte ganze Zahl, die kleiner oder gleich $m/2$ ist:

$$\lfloor m/2 \rfloor = \begin{cases} \frac{m}{2} & \text{für } m \text{ gerade} \\ \frac{m-1}{2} & \text{für } m \text{ ungerade} \end{cases}$$

Satz 4.4. Sei $m > 1$. Dann hat die Matrix $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ die positiven Eigenwerte

$$\lambda_k = 2k(2(m-k) + 1) > 0$$

mit den Vielfachheiten

$$\nu_k = 2m - 4k + 1$$

wobei k die Werte $1, 2, \dots, \lfloor m/2 \rfloor$ annimmt.

Beweis. Es gibt $\lfloor m/2 \rfloor$ Paare (m_0, k) , die die Bedingungen

$$m = m_0 + 2k \text{ und } 0 \leq m_0 < m \text{ sowie } k \geq 1 \text{ ganzzahlig}$$

erfüllen. Dabei nimmt k die Werte $1, 2, \dots, \lfloor m/2 \rfloor$ an.

Für jedes dieser Paare (m_0, k) gilt Satz 4.3: $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ hat $n_{N_{m_0}} = 2m_0 + 1$ Eigenwerte $\lambda_{m_0, k} = 2k(2(m_0 + k) + 1)$. Mit $m_0 = m - 2k$ folgt:

$$\begin{aligned} \lambda_k &\doteq \lambda_{m-2k, k} = 2k(2(m-2k+k) + 1) \\ &= 2k(2(m-k) + 1) \end{aligned}$$

Für die Vielfachheit ν_k dieses Eigenwertes ergibt sich

$$\nu_k = 2m_0 + 1 = 2(m - 2k) + 1 = 2m - 4k + 1$$

Nach Korollar 4.2 (d) hat $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ $2m + 1$ Eigenwerte zum Eigenwert Null. Zu zeigen

ist also noch, dass die Summe

$$s_m = 2m + 1 + \sum_{k=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \nu_k$$

gleich der Gesamtzahl $d_m = (m+1)(m+2)/2$ der Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ ist. Es gilt:

$$\begin{aligned} s_m &= 2m + 1 + \sum_{k=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} \nu_k \\ &= 2m + 1 + \sum_{k=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} (2m - 4k + 1) \\ &= 2m + 1 + (2m + 1) \lfloor m/2 \rfloor - 4 \sum_{k=1}^{\lfloor m/2 \rfloor} k \\ &= (2m + 1) (\lfloor m/2 \rfloor + 1) - 4 \frac{\lfloor m/2 \rfloor (\lfloor m/2 \rfloor + 1)}{2} \\ &= (2m + 1) (\lfloor m/2 \rfloor + 1) - 2 \lfloor m/2 \rfloor (\lfloor m/2 \rfloor + 1) \\ &= (2m + 1 - 2 \lfloor m/2 \rfloor) (\lfloor m/2 \rfloor + 1) \end{aligned}$$

Für gerades m , $m = 2\lfloor m/2 \rfloor$, ist diese Summe gleich

$$\begin{aligned} s_{2\lfloor m/2 \rfloor} &= (m + 1) (\lfloor m/2 \rfloor + 1) \\ &= \frac{2(m + 1) (\lfloor m/2 \rfloor + 1)}{2} \\ &= \frac{(m + 1)(m + 2)}{2} \end{aligned}$$

Und für ungerades m , $m = 2\lfloor m/2 \rfloor + 1$, gilt:

$$\begin{aligned} s_{2\lfloor m/2 \rfloor + 1} &= (m + 2) (\lfloor m/2 \rfloor + 1) \\ &= \frac{2(m + 2) (\lfloor m/2 \rfloor + 1)}{2} \\ &= \frac{(m + 2)(m + 1)}{2} \end{aligned}$$

Damit ist gezeigt, dass $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ außer Null und den λ_k keine weiteren Eigenwerte haben kann. □

Das folgende Korollar formuliert den Satz 4.4 in Abhängigkeit von m_0 anstelle k .

Korollar 4.3. Sei $m > 1$. Dann hat die Matrix $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ die positiven Eigenwerte

$$\tilde{\lambda}_{m_0} = (m - m_0)(m + m_0 + 1) > 0$$

mit den Vielfachheiten $\tilde{\nu}_{m_0} = 2m_0 + 1$, wobei m_0 für gerades m die Werte $m - 2, m - 4, \dots, 0$ annimmt und für ungerades m die Werte $m - 2, m - 4, \dots, 1$.

Beweis. Dies folgt direkt aus dem Beweis von Satz 4.4.

Es gibt $\lfloor m/2 \rfloor$ Paare (m_0, k) , die die Bedingungen

$$m = m_0 + 2k \text{ und } 0 \leq m_0 < m \text{ sowie } k \geq 1 \text{ ganzzahlig}$$

erfüllen. Dabei nimmt m_0 für gerades m die Werte $m - 2, m - 4, \dots, 0$ an und für ungerades m die Werte $m - 2, m - 4, \dots, 1$.

Mit $2k = m - m_0$ folgt für die Eigenwerte $\lambda_{m_0, k}$ aus Satz 4.3:

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_{m_0} \doteq \lambda_{m_0, k} &= 2k(2(m_0 + k) + 1) \\ &= (m - m_0)(m + m_0 + 1) \end{aligned}$$

□

Die Tabellen 4.1 und 4.2 präsentieren die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ und ihre Vielfachheiten für $m \leq 8$.

Bemerkung 4.4. zur numerischen Berechnung der Eigenvektoren nach Satz 4.3.

Der numerische Fehler f von $E_{(m)}$ lässt sich durch

$$(\Delta^T \Delta)^{(m)} E_{(m)} - E_{(m)} D_{(m)}^2 = f$$

(siehe Gleichung (3.26)) direkt berechnen, da mit $D_{(m)}^2$ die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ exakt bekannt sind.

m	$4m + 6$	1	5	9	13	17
0	6	0				
2	14	6	0			
4	22	20	14	0		
6	30	42	36	22	0	
8	38	72	66	52	30	0

Tabelle 4.1: Die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ für gerades m , geordnet nach ihren Vielfachheiten 1, 5, 9, 13 und 17.

m	$4m + 6$	3	7	11	15
1	10	0			
3	18	10	0		
5	26	28	18	0	
7	34	54	44	26	0

Tabelle 4.2: Die Eigenwerte von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ für ungerades m , geordnet nach ihren Vielfachheiten 3, 7, 11 und 15.

4.6 Zur mehrfachen Anwendung des Laplace-Operators

Die Parallelen zwischen den singulären Vektoren des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten und den Kugelflächenfunktionen, die ich in Kapitel 6, speziell im Abschnitt 6.3 aufzeige, motivieren den unten folgenden Satz 4.5. Das Lemma 4.1 dient seiner Vorbereitung.

Lemma 4.1. *Es bezeichne $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ das Quadrat des Abstands des Punktes $(x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ zum Koordinatenursprung. Sei $k \geq 1$ ganzzahlig. Dann stellt der Koeffizientenvektor $b^{(k)}$ mit den Komponenten*

$$b_{q,|q|=2k}^{(k)} = \frac{k! \sqrt{q!}}{s!} \delta_{q,2s} \quad \text{mit} \quad |s| = k \quad \text{und} \quad |q| = 2k \quad (4.18)$$

das Polynom

$$r^{2k} = (x^2 + y^2 + z^2)^k$$

im Vektorraum der Polynomkoeffizienten dar. Insbesondere gilt für $k = 1$: Der Vektor

$$b^{(1)} = \begin{pmatrix} b_{(2,0,0)}^{(1)} \\ b_{(0,2,0)}^{(1)} \\ b_{(0,0,2)}^{(1)} \\ b_{(1,1,0)}^{(1)} \\ b_{(1,0,1)}^{(1)} \\ b_{(0,0,1)}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ \sqrt{2} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} \quad (4.19)$$

ist der Koeffizientenvektor des Polynoms $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ im Vektorraum der Polynomkoeffizienten.

Beweis. Laut Lemma 2.2 gilt unter Verwendung von $s_3 = k - s_1 - s_2$:

$$\begin{aligned} r^{2k} &= (x^2 + y^2 + z^2)^k \\ &= \sum_{\substack{s_1, s_2, s_3 \\ |s|=k}} \frac{k!}{s_1! s_2! s_3!} x^{2s_1} y^{2s_2} z^{2s_3} \\ &= \sum_{\substack{s_1, s_2, s_3 \\ |s|=k}} \frac{k! \sqrt{(2s_1)!} \sqrt{(2s_2)!} \sqrt{(2s_3)!}}{s_1! s_2! s_3!} \frac{x^{2s_1}}{\sqrt{(2s_1)!}} \frac{y^{2s_2}}{\sqrt{(2s_2)!}} \frac{z^{2s_3}}{\sqrt{(2s_3)!}} \end{aligned}$$

Die Komponenten des Koeffizientenvektors $b^{(k)}$ von r^{2k} im Vektorraum der Polynomkoeffizienten sind folglich:

$$b_q^{(k)} = \frac{k! \sqrt{q!}}{s!} \delta_{q, 2s} \quad \text{mit} \quad |s| = k \quad \text{und} \quad |q| = 2k$$

Für $k = 1$ folgt die Behauptung auch direkt aus

$$r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = \sqrt{2} \left(\frac{x^2}{\sqrt{2}} + \frac{y^2}{\sqrt{2}} + \frac{z^2}{\sqrt{2}} \right) = \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \\ k_1 + k_2 + k_3 = 2}} b_{(k_1, k_2, k_3)}^{(1)} \frac{x^{k_1} y^{k_2} z^{k_3}}{\sqrt{k_1! k_2! k_3!}}$$

□

Der folgende Satz besagt, dass die Matrix, die nach Gleichung (2.7) die Multiplikation eines Polynoms mit r^{2k} im Vektorraum der Polynomkoeffizienten darstellt, gleich der k -fachen Anwendung der Transponierten des Laplace-Operators im entsprechenden Monomraum ist. Man beachte in diesem Zusammenhang Satz 4.3 und die darauf folgende Bemerkung.

Satz 4.5. *Multiplikation eines Monoms mit r^{2k}*

Seien $m_0 \geq 0$ und $k \geq 1$ ganzzahlig wie in Satz 4.3 gegeben. Sei $b^{(k)}$ der zu r^{2k} gehörende Koeffizientenvektor in Gleichung (4.18) und a der Koeffizientenvektor eines Monoms vom Grad $m_1 = m_0$. Die Matrix $M_{b^{(k)}}$, die im Vektorraum der Polynomkoeffizienten die Multiplikation des Monoms mit r^{2k} , also die Multiplikation von a mit $b^{(k)}$, beschreibt, ist durch die Gleichungen (2.7) und (2.8) definiert. Δ^k sei wie in Satz 2.4 im Abschnitt 2.9 definiert. Dann gilt:

$$(\Delta^k)^T = (\Delta^{(m_0+2, m_0)} \Delta^{(m_0+4, m_0+2)} \dots \Delta^{(m_0+2k, m_0+2k-2)})^T = M_{b^{(k)}}$$

p und q seien Multi-Indizes mit $|p| = m_0$ und $|q| = m_0 + 2k$. Dann gilt für die Matrixelemente:

$$\begin{aligned} (\Delta^k)_{q,p}^T &= (\Delta^{(m_0+2, m_0)} \Delta^{(m_0+4, m_0+2)} \dots \Delta^{(m_0+2k, m_0+2k-2)})_{p,q} \\ &= \sum_{\substack{s \\ |s|=k}} \frac{k!}{s!} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{(q-2s)!}} \delta_{q,p+2s} \\ &= (M_{b^{(k)}})_{q,p} \end{aligned}$$

Die Summe enthält höchstens einen Summanden, da es zu gegebenen Multi-Indizes p und q höchstens einen Multi-Index s mit $|s| = k$ und $2s = q - p$ gibt.

Insbesondere gilt für $k = 1$ mit $b^{(1)}$ aus Gleichung (4.19):

$$(\Delta^{(m_0+2, m_0)})^T = M_{b^{(1)}}$$

sowie

$$\begin{aligned} \Delta_{pq}^{(m_0+2, m_0)} &= (M_{b^{(1)}})_{q,p} \\ &= \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{p, q-(2,0,0)} + \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{p, q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{p, q-(0,0,2)} \end{aligned}$$

Beweis. Sei a , wie vorausgesetzt, der Koeffizientenvektor eines Monoms vom Grad m_0 . Der Koeffizientenvektor c des Produkts von a mit $b^{(k)}$ ist laut Gleichung (2.8) gleich

$$c_q = \sum_{|p|=m_0} (M_{b^{(k)}})_{q,p} a_p$$

wobei die Matrix $M_{b^{(k)}}$ durch

$$(M_{b^{(k)}})_{q,p} = \begin{cases} b_{q-p}^{(k)} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{p!} \sqrt{(q-p)!}}, & \text{für } q-p \geq 0 \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

definiert ist (vgl. Gleichung (2.7)). Hier gilt: $|p| = m_0$, $|q| = m_0 + 2k$ und $|q - p| = 2k$.

Mit $b_q^{(k)}$ aus Gleichung (4.18) folgt aus

$$\begin{aligned}
 (M_{b^{(k)}})_{q,p} &= b_{q-p}^{(k)} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{p!}\sqrt{(q-p)!}} \\
 &= \frac{k! \sqrt{(q-p)!}}{s!} \frac{\sqrt{q!}}{\sqrt{p!}\sqrt{(q-p)!}} \delta_{q-p,2s} \\
 &= \frac{k! \sqrt{q!}}{s! \sqrt{p!}} \delta_{q-p,2s} \\
 &= \frac{k! \sqrt{q!}}{s! \sqrt{(q-2s)!}} \delta_{q-p,2s}
 \end{aligned}$$

und Satz 2.4

$$(\Delta^k)_{pq} = \sum_{|s|=k} \frac{k!}{s!} \sqrt{\frac{q!}{(q-2s)!}} \delta_{p,q-2s}$$

die Behauptung. Die Matrixelemente $(M_{b^{(k)}})_{q,p}$ sind genau dann von Null verschieden, wenn es einen Multi-Index s mit $q - p = 2s$ und $|s| = k$ gibt.

Für $k = 1$ gilt:

$$(M_{b^{(1)}})_{q,p} = \begin{cases} \sqrt{q_1(q_1 - 1)}, & \text{für } q - p = (2, 0, 0) \\ \sqrt{q_2(q_2 - 1)}, & \text{für } q - p = (0, 2, 0) \\ \sqrt{q_3(q_3 - 1)}, & \text{für } q - p = (0, 0, 2) \\ 0, & \text{sonst} \end{cases}$$

Der Vergleich mit Gleichung (3.12)

$$\Delta_{pq}^{(m_0+2,m_0)} = \sqrt{q_1(q_1 - 1)} \delta_{p,q-(2,0,0)} + \sqrt{q_2(q_2 - 1)} \delta_{p,q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3 - 1)} \delta_{p,q-(0,0,2)}$$

zeigt die Behauptung:

$$(M_{b^{(1)}})_{q,p} = \Delta_{p,q}^{(m_0+2,m_0)}$$

□

5 Vier invariante Unterräume in jedem Monomraum

In diesem Kapitel 5 zeige ich, dass sich der Laplace-Operator für jeden Monomgrad $m \geq 2$ bei geeigneter Wahl der Reihenfolge der Basismonome als

$$\Delta^{(m,m-2)} = \begin{pmatrix} \Delta_{\text{I}}^{(m,m-2)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \Delta_{\text{II}}^{(m,m-2)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \Delta_{\text{III}}^{(m,m-2)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \Delta_{\text{IV}}^{(m,m-2)} \end{pmatrix}$$

darstellen lässt. Für $m < 2$ ergeben sich Spezialfälle (siehe Abschnitt 4.4).

Entsprechend zerfallen auch $(\Delta\Delta^T)^{(m)}$ und $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ für jeden Monomgrad $m \geq 2$ in vier Blöcke $i = \text{I, II, III und IV}$:

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)_i^{(m)} &\doteq \Delta_i^{(m,m-2)} \left(\Delta_i^{(m,m-2)} \right)^T \\ (\Delta^T\Delta)_i^{(m)} &\doteq \left(\Delta_i^{(m,m-2)} \right)^T \Delta_i^{(m,m-2)} \end{aligned}$$

5.1 Definition der vier Unterräume

Die Zerlegung in Blöcke beruht auf der Unterscheidung, ob die Exponenten $q = (q_1, q_2, q_3)$ von $x = (x_1, x_2, x_3)$ gerade oder ungerade sind, denn der Laplace-Operator bildet gerade Exponenten in gerade Exponenten und ungerade Exponenten in ungerade ab.

Satz 5.1. *Sei $m = 2\tilde{m} \geq 2$ eine gerade Zahl. Dann lassen sich die d_m Basismonome vom Grad m in vier Mengen aufteilen:*

$$\mathbb{B}_i^{(m)} = \left\{ \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}_i^{(m)} \right\}$$

mit

$$\begin{aligned}\mathbb{X}_I^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k}), 2(\tilde{k} - \tilde{l}), 2\tilde{l} \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{II}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1) + 1, 2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1, 2\tilde{l} \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{III}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1) + 1, 2(\tilde{k} - \tilde{l}), 2\tilde{l} + 1 \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{IV}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1), 2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1, 2\tilde{l} + 1 \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\}\end{aligned}$$

Beweis. Schreibt man die Exponenten eines Monoms m -ten Grades wie in Gleichung (2.5) in Abhängigkeit von k und l :

$$\sum_{\substack{q=(q_1,q_2,q_3) \\ |q|=m}} a_{(q_1,q_2,q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} = \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^k a_{(m-k,k-l,l)} \frac{x_1^{m-k}}{\sqrt{(m-k)!}} \frac{x_2^{k-l}}{\sqrt{(k-l)!}} \frac{x_3^l}{\sqrt{l!}}$$

so gilt für gerades $m \geq 2$ mit $m = 2\tilde{m}$:

$$\begin{aligned}& \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^k a_{(m-k,k-l,l)} \frac{x_1^{m-k}}{\sqrt{(m-k)!}} \frac{x_2^{k-l}}{\sqrt{(k-l)!}} \frac{x_3^l}{\sqrt{l!}} \\ &= \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}), 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k})}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{2(\tilde{k}-\tilde{l})!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}} \\ &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}} \\ &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l}))!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}} \\ &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1), 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}}\end{aligned}$$

Die vier Summen sind die vier Mengen $\mathbb{B}_i^{(m)}$:

1. In der ersten Summe ($\mathbb{B}_I^{(m)}$) sind k und l gerade ($k = 2\tilde{k}$, $l = 2\tilde{l}$) und alle Exponenten gerade.
2. In der zweiten Summe ($\mathbb{B}_{II}^{(m)}$) ist k ungerade und l gerade ($k = 2\tilde{k} + 1$, $l = 2\tilde{l}$), die Exponenten q_1 und q_2 von x_1 und x_2 sind ungerade.
3. In der dritten Summe ($\mathbb{B}_{III}^{(m)}$) sind k und l beide ungerade ($k = 2\tilde{k} + 1$, $l = 2\tilde{l} + 1$), die Exponenten q_1 und q_3 von x_1 und x_3 sind ungerade.

m	Menge	q_1	q_2	q_3	\tilde{k}_{\max}	# Monome
$2\tilde{m}$	I	$2(\tilde{m} - \tilde{k})$	$2(\tilde{k} - \tilde{l})$	$2\tilde{l}$	\tilde{m}	$(\tilde{m} + 1)(\tilde{m} + 2)/2$
	II	$2(\tilde{m} - \tilde{k}) - 1$	$2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1$	$2\tilde{l}$	$\tilde{m} - 1$	$\tilde{m}(\tilde{m} + 1)/2$
	III	$2(\tilde{m} - \tilde{k}) - 1$	$2(\tilde{k} - \tilde{l})$	$2\tilde{l} + 1$	$\tilde{m} - 1$	$\tilde{m}(\tilde{m} + 1)/2$
	IV	$2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1)$	$2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1$	$2\tilde{l} + 1$	$\tilde{m} - 1$	$\tilde{m}(\tilde{m} + 1)/2$

Tabelle 5.1: Werte der Exponenten $q = (q_1, q_2, q_3)$, Maximalwert \tilde{k}_{\max} von \tilde{k} sowie die Anzahl der entsprechenden Monome für gerades $m = 2\tilde{m}$.

4. In der vierten Summe ($\mathbb{B}_{\text{IV}}^{(m)}$) ist k gerade und l ist ungerade ($k = 2\tilde{k}$, $l = 2\tilde{l} + 1$), die Exponenten q_2 und q_3 von x_2 und x_3 sind ungerade.

Für $m = 0$ reduziert sich die Zerlegung auf die Menge $\mathbb{B}_I^{(0)} = \{1\}$ mit $\mathbb{X}_I^{(0)} = \{(0, 0, 0)\}$, d. h. die zweite, dritte und vierte Menge sind leer.

Die Eigenschaften der vier Mengen sind in Tabelle 5.1 zusammengestellt. \tilde{k}_{\max} bezeichnet den maximalen Wert, den \tilde{k} annimmt. Die Anzahl der Elemente der Mengen wird in Korollar 5.1 berechnet. \square

Satz 5.2. Sei $m = 2\tilde{m} + 1 \geq 3$ eine ungerade Zahl. Dann lassen sich die d_m Basismonome vom Grad m in vier Mengen aufteilen:

$$\mathbb{B}_i^{(m)} = \left\{ \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}_i^{(m)} \right\}$$

mit

$$\begin{aligned} \mathbb{X}_I^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k}) + 1, 2(\tilde{k} - \tilde{l}), 2\tilde{l} \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{\text{II}}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k}), 2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1, 2\tilde{l} \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{\text{III}}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k}), 2(\tilde{k} - \tilde{l}), 2\tilde{l} + 1 \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \\ \mathbb{X}_{\text{IV}}^{(m)} &= \left\{ q \mid q = \left(2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1) + 1, 2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1, 2\tilde{l} + 1 \right), \tilde{k}, \tilde{l} \in \mathbb{N}_0, |q| = m \right\} \end{aligned}$$

Beweis. Analog wie im Beweis von Satz 5.1 gilt für $m = 2\tilde{m} + 1 \geq 3$ ungerade:

$$\begin{aligned} & \sum_{\substack{q=(q_1, q_2, q_3) \\ |q|=m}} a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \\ &= \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^k a_{(m-k, k-l, l)} \frac{x_1^{m-k}}{\sqrt{(m-k)!}} \frac{x_2^{k-l}}{\sqrt{(k-l)!}} \frac{x_3^l}{\sqrt{l!}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k})+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k})+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{2(\tilde{k}-\tilde{l})!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}} \\
&+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}), 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k})}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k})!)} } \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}} \\
&+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}), 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k})}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k})!)} } \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})!)} } \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}} \\
&+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l}+1)} \\
&\quad \times \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}}
\end{aligned}$$

Ich bezeichne auch für ungerades m die vier Summen als $\mathbb{B}_i^{(m)}$, $i=I, II, III$ und IV . Tabelle 5.2 fasst ihre Eigenschaften zusammen. Für $m = 1$ enthält die vierte Summe keinen Summanden und die Menge $\mathbb{B}_{IV}^{(1)}$ ist leer. \square

m	Menge	q_1	q_2	q_3	\tilde{k}_{\max}	# Monome
$2\tilde{m}+1$	I	$2(\tilde{m}-\tilde{k})+1$	$2(\tilde{k}-\tilde{l})$	$2\tilde{l}$	\tilde{m}	$(\tilde{m}+1)(\tilde{m}+2)/2$
	II	$2(\tilde{m}-\tilde{k})$	$2(\tilde{k}-\tilde{l})+1$	$2\tilde{l}$	\tilde{m}	$(\tilde{m}+1)(\tilde{m}+2)/2$
	III	$2(\tilde{m}-\tilde{k})$	$2(\tilde{k}-\tilde{l})$	$2\tilde{l}+1$	\tilde{m}	$(\tilde{m}+1)(\tilde{m}+2)/2$
	IV	$2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1$	$2(\tilde{k}-\tilde{l})+1$	$2\tilde{l}+1$	$\tilde{m}-1$	$\tilde{m}(\tilde{m}+1)/2$

Tabelle 5.2: Werte der Exponenten $q = (q_1, q_2, q_3)$, Maximalwert \tilde{k}_{\max} von \tilde{k} sowie die Anzahl der entsprechenden Monome für ungerades m .

Korollar 5.1. *Die Summe*

$$\sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}}$$

in den Beweisen der Sätze 5.1 und 5.2 hat $(\tilde{m}+1)(\tilde{m}+2)/2$ Summanden, die Summe

$$\sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}}$$

hat $\tilde{m}(\tilde{m}+1)/2$ Summanden. Mit der Angabe von \tilde{k}_{\max} in den Tabellen 5.1 und 5.2 ist diese Anzahl einheitlich gleich

$$d_{\tilde{k}_{\max}} = \frac{(\tilde{k}_{\max}+1)(\tilde{k}_{\max}+2)}{2}$$

Die zugehörigen Mengen $\mathbb{X}_i^{(m)}$ haben demzufolge $d_{\tilde{k}_{\max}}$ Elemente und $(\Delta^T \Delta)_i^{(m)}$ ist eine $d_{\tilde{k}_{\max}} \times d_{\tilde{k}_{\max}}$ -Matrix.

Beweis. Die Anzahl der Summanden der ersten Summe berechnet sich zu

$$\sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} 1 = \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} (\tilde{k} + 1) = \sum_{\tilde{k}=1}^{\tilde{m}+1} \tilde{k} = \frac{(\tilde{m} + 1)(\tilde{m} + 2)}{2}$$

Die zweite folgt durch $\tilde{m} \rightarrow \tilde{m} - 1$ □

Für $m = 2\tilde{m}$ haben nach Tabelle 5.1 die vier Mengen insgesamt

$$d_{\tilde{m}} + 3d_{\tilde{m}-1} = \frac{(\tilde{m} + 1)(\tilde{m} + 2)}{2} + 3 \frac{\tilde{m}(\tilde{m} + 1)}{2} = \frac{2(\tilde{m} + 1)(2\tilde{m} + 1)}{2} = \frac{(m + 2)(m + 1)}{2}$$

Elemente. Für $m = 2\tilde{m} + 1$ haben die vier Mengen nach Tabelle 5.2 insgesamt

$$3d_{\tilde{m}} + d_{\tilde{m}-1} = 3 \frac{(\tilde{m} + 1)(\tilde{m} + 2)}{2} + \frac{\tilde{m}(\tilde{m} + 1)}{2} = \frac{2(\tilde{m} + 1)(2\tilde{m} + 3)}{2} = \frac{(m + 1)(m + 2)}{2}$$

Elemente.

5.2 Die Invarianz der vier Unterräume

Der folgende Satz ist eine Folge davon, dass der Laplace-Operator gerade Exponenten der Variablen in gerade Exponenten überführt und ungerade in ungerade.

Satz 5.3. Sei $m \geq 2$ ganzzahlig und seien die Mengen $\mathbb{B}_i^{(m)}$, $i=I, II, III$ und IV wie in Satz 5.1 (für m gerade) oder in Satz 5.2 (für m ungerade) definiert. Sei a mit Komponenten a_q der Koeffizientenvektor eines Monoms vom Grad m . Es gebe genau ein i mit

$$q \notin \mathbb{X}_i^{(m)} \Rightarrow a_q = 0 \tag{5.1}$$

Für die Koeffizienten von

$$\begin{aligned} b &= \Delta^{(m, m-2)} a \\ c &= (\Delta \Delta^T)^{(m+2)} a \\ d &= (\Delta^T \Delta)^{(m)} a \end{aligned}$$

gilt dann:

$$\begin{aligned} q \notin \mathbb{X}_i^{(m-2)} &\Rightarrow b_q = 0 \\ q \notin \mathbb{X}_i^{(m)} &\Rightarrow c_q = 0 \\ q \notin \mathbb{X}_i^{(m)} &\Rightarrow d_q = 0 \end{aligned}$$

Die am Beginn des Kapitels 5 definierten Matrizen $\Delta_i^{(m,m-2)}$, $(\Delta\Delta^T)_i^{(m+2)}$ und $(\Delta^T\Delta)_i^{(m)}$ sind die Einschränkungen von $\Delta^{(m,m-2)}$, $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ sowie $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ auf den Vektorraum aller Koeffizientenvektoren a mit der Eigenschaft (5.1).

Beweis. Dies ist eine direkte Folge der Darstellungen

$$\Delta_{rq}^{(m,m-2)} = \sqrt{q_1(q_1-1)} \delta_{r,q-(2,0,0)} + \sqrt{q_2(q_2-1)} \delta_{r,q-(0,2,0)} + \sqrt{q_3(q_3-1)} \delta_{r,q-(0,0,2)}$$

(siehe Gleichung (3.12)),

$$\begin{aligned} (\Delta\Delta^T)_{rq}^{(m+2)} &= ((r_1+2)(r_1+1) + (r_2+2)(r_2+1) + (r_3+2)(r_3+1)) \delta_{r,q} \\ &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(2,-2,0)} \\ &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(2,0,-2)} \\ &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,2,0)} \\ &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(0,2,-2)} \\ &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,0,2)} \\ &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(0,-2,2)} \end{aligned}$$

(siehe Gleichung (4.2)) und

$$\begin{aligned} (\Delta^T\Delta)_{rq}^{(m)} &= r_1(r_1-1) \delta_{r,q} + r_2(r_2-1) \delta_{r,q} + r_3(r_3-1) \delta_{r,q} \\ &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(2,-2,0)} \\ &\quad + \sqrt{r_1(r_1-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(2,0,-2)} \\ &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,2,0)} \\ &\quad + \sqrt{r_2(r_2-1)(r_3+2)(r_3+1)} \delta_{r,q+(0,2,-2)} \\ &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_1+2)(r_1+1)} \delta_{r,q+(-2,0,2)} \\ &\quad + \sqrt{r_3(r_3-1)(r_2+2)(r_2+1)} \delta_{r,q+(0,-2,2)} \end{aligned}$$

(siehe Gleichung (4.3)), denn es gilt laut Voraussetzungen:

$$b_r = \sum_{\substack{q \\ |q|=m}} \Delta_{rq}^{(m,m-2)} a_q$$

$$\begin{aligned}
 c_r &= \sum_{\substack{q \\ |q|=m}} (\Delta \Delta^T)_{rq}^{(m+2)} a_q \\
 d_r &= \sum_{\substack{q \\ |q|=m}} (\Delta^T \Delta)_{rq}^{(m)} a_q
 \end{aligned}$$

□

Definition 5.1. In Analogie zur Definition 2.2 bezeichne $\mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m)})$ die lineare Hülle von $\mathbb{B}_i^{(m)}$:

$$\mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m)}) = \left\{ \sum_q a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \in \mathbb{B}_i^{(m)}, a_q \in \mathbb{R} \right\} = \left\{ \sum_q a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}_i^{(m)}, a_q \in \mathbb{R} \right\}$$

Korollar 5.2. Sei $m \geq 2$ ganzzahlig und seien die Mengen $\mathbb{B}_i^{(m)}$, $i=I, II, III$ und IV wie in Satz 5.1 (für m gerade) oder in Satz 5.2 (für m ungerade) definiert. Dann gilt bei der Anwendung des Laplace-Operators Δ auf die Elemente der Menge $\mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m)})$:

$$\Delta \mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m)}) = \mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m-2)})$$

Beweis. Die Aussage folgt direkt aus Satz 5.3 und

$$\begin{aligned}
 \Delta \mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m)}) &= \left\{ \Delta \sum_q a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}_i^{(m)}, a_q \in \mathbb{R} \right\} \\
 &= \left\{ \sum_q a_q \frac{x^q}{\sqrt{q!}} \mid q \in \mathbb{X}_i^{(m-2)}, a_q \in \mathbb{R} \right\} \\
 &= \mathcal{L}(\mathbb{B}_i^{(m-2)})
 \end{aligned}$$

□

Die Operatoren L_+ und L_- aus Abschnitt 6.1, die laut Abschnitt 6.4 zur sukzessiven Berechnung der Eigenvektoren zu Eigenwerten Null verwendet werden können, weisen nicht die hier gezeigte Blockstruktur auf. Dies muss beim Übergang von den komplexwertigen zu den reellen Kugelflächenfunktionen berücksichtigt werden.

5.3 Beispiele: $m = 2$ und $m = 3$

Die folgenden Beispiele sind bereits aus Abschnitt 4.4 bekannt. Für $m = 2$ folgt aus

$$\begin{aligned}\mathbb{X}_I^{(2)} &= \{(2, 0, 0), (0, 2, 0), (0, 0, 2)\} \\ \mathbb{X}_{II}^{(2)} &= \{(1, 1, 0)\} \\ \mathbb{X}_{III}^{(2)} &= \{(1, 0, 1)\} \\ \mathbb{X}_{IV}^{(2)} &= \{(0, 1, 1)\}\end{aligned}$$

die Darstellung

$$\Delta^{(2,0)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (2,0,0) & (0,2,0) & (0,0,2) & (1,1,0) & (1,0,1) & (0,1,1) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (0,0,0) \end{matrix} & \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \end{matrix}$$

Für $m = 3$ führt

$$\begin{aligned}\mathbb{X}_I^{(3)} &= \{(3, 0, 0), (1, 2, 0), (1, 0, 2)\} \\ \mathbb{X}_{II}^{(3)} &= \{(2, 1, 0), (0, 3, 0), (0, 1, 2)\} \\ \mathbb{X}_{III}^{(3)} &= \{(2, 0, 1), (0, 2, 1), (0, 0, 3)\} \\ \mathbb{X}_{IV}^{(3)} &= \{(1, 1, 1)\}\end{aligned}$$

zu

$$\Delta^{(3,1)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} (3,0,0) & (1,2,0) & (1,0,2) & (2,1,0) & (0,3,0) & (0,1,2) & (2,0,1) & (0,2,1) & (0,0,3) & (1,1,1) \end{matrix} \\ \begin{matrix} (1,0,0) \\ (0,1,0) \\ (0,0,1) \end{matrix} & \begin{pmatrix} \sqrt{6} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \cdot \end{pmatrix} \end{matrix}$$

5.4 Zur sukzessiven Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators

Durch eine geeignete Wahl der Reihenfolge der Basismonome lassen sich sämtliche Matrizen des Kapitels 4 in derselben Blockstruktur wie $\Delta^{(m,m-2)}$, $(\Delta\Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ darstellen.

Korollar 5.3. Sei $m \geq 0$. Sei e ein Eigenvektor von $(\Delta^T\Delta)^{(m)}$ mit der Eigenschaft, dass

genau ein i , $i = I, II, III$ oder IV , existiert, für welches gilt:

$$q \notin \mathbb{X}_i^{(m)} \Rightarrow e_q = 0$$

Dann ist e auch ein Eigenvektor von $(\Delta^T \Delta)_i^{(m)}$ sowie $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ und $(\Delta \Delta^T)_i^{(m+2)}$. Die Matrix $V_{(m,i)}$ sei aus allen Eigenvektoren e von $(\Delta^T \Delta)_i^{(m)}$ zu festem i gebildet; die Spaltenvektoren von $V_{(m,i)}$ sind also diese e . Dann lassen sich die Matrix $V_{(m)}$ und $U_{(m+2)}$ als

$$V_{(m)} = \begin{pmatrix} V_{(m,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & V_{(m,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & V_{(m,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & V_{(m,IV)} \end{pmatrix}$$

und

$$U_{(m+2)} = \begin{pmatrix} U_{(m+2,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & U_{(m+2,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & U_{(m+2,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & U_{(m+2,IV)} \end{pmatrix}$$

schreiben. Für die aus den Eigenwerten gebildete Diagonalmatrix $D_{(m)}$ gilt entsprechend:

$$D_{(m)} = \begin{pmatrix} D_{(m,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & D_{(m,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & D_{(m,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & D_{(m,IV)} \end{pmatrix}$$

Beweis. Dies folgt direkt aus Korollar 4.1, Korollar 4.2 (e) und Satz 5.3. □

Nach den Ausführungen in Kapitel 4 erfordert dieses Vorgehen, dass auch die Eigenvektoren von $(\Delta \Delta^T)^{(m+2)}$ zum Eigenwert Null der Blockstruktur genügen, also Eigenvektoren der Matrizen $(\Delta \Delta^T)_i^{(m+2)}$ sind. In diesem Fall gilt:

$$N_{(m+2)} = \begin{pmatrix} N_{(m+2,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & N_{(m+2,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & N_{(m+2,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & N_{(m+2,IV)} \end{pmatrix}$$

Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)_i^{(m)}$ zu Eigenwerten ungleich Null bilden die Spaltenvektoren

der Matrix $E_{(m,i)}$ mit

$$E_{(m)} = \begin{pmatrix} E_{(m,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & E_{(m,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & E_{(m,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & E_{(m,IV)} \end{pmatrix}$$

Damit lässt sich $V_{(m)}$ auch als

$$\begin{aligned} V_{(m)} &= \begin{pmatrix} V_{(m,I)} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & V_{(m,II)} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & V_{(m,III)} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & V_{(m,IV)} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} (E_{(m,I)} N_{(m,I)}) & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & (E_{(m,II)} N_{(m,II)}) & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & (E_{(m,III)} N_{(m,III)}) & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & (E_{(m,IV)} N_{(m,IV)}) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

schreiben. Durch die Blockbildung reicht es aus, die Matrizen $E_{(m,i)}$ und $N_{(m,i)}$ für alle $i = I, II, III$ und IV anstelle von $E_{(m)}$ und $N_{(m)}$ zu speichern. Dies reduziert den Speicherbedarf auf ein Viertel.

Es gilt:

Satz 5.4. Sei $m \geq 0$. Es gilt für $i, i = I, II, III$ und IV :

$$\begin{aligned} \left(\Delta_i^{(m+2,m)}\right)^\dagger &= \left(\Delta_i^{(m+2,m)}\right)^\top U_{(m+2,i)} D_{(m+2,i)}^{-2} U_{(m+2,i)}^\top \\ E_{(m+2,i)} &= \left(\Delta_i^{(m+2,m)}\right)^\top U_{(m+2,i)} D_{(m+2,i)}^{-1} \\ \Delta_i^{(m+2,m)} E_{(m+2,i)} &= U_{(m+2,i)} D_{(m+2,i)} \end{aligned}$$

Beweis. Dies folgt aus Satz 4.2 und den oben eingeführten Notationen. □

Satz 5.5. Sei $m \geq 2$ gerade. Dann haben die Mengen $\mathbb{X}_{II}^{(m)}$, $\mathbb{X}_{III}^{(m)}$ und $\mathbb{X}_{IV}^{(m)}$ dieselbe Anzahl Elemente und diese Elemente gehen durch Vertauschung von y mit z und x mit z auseinander hervor:

$$q = (q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{X}_{II}^{(m)} \iff (q_1, q_3, q_2) \in \mathbb{X}_{III}^{(m)} \iff (q_3, q_2, q_1) \in \mathbb{X}_{IV}^{(m)}$$

Beweis. Der Beweis wird durch eine entsprechende Änderung der Parametrisierung im Beweis von Satz 5.1 erbracht.

Aus dem Beweis von Satz 5.1 ist die folgende Zerlegung eines Monoms vom Grad $m = 2\tilde{m} \geq 2$ bereits bekannt:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\substack{q=(q_1, q_2, q_3) \\ |q|=m}} a_{(q_1, q_2, q_3)} \frac{x_1^{q_1}}{\sqrt{q_1!}} \frac{x_2^{q_2}}{\sqrt{q_2!}} \frac{x_3^{q_3}}{\sqrt{q_3!}} \\
 &= \sum_{k=0}^m \sum_{l=0}^k a_{(m-k, k-l, l)} \frac{x_1^{m-k}}{\sqrt{(m-k)!}} \frac{x_2^{k-l}}{\sqrt{(k-l)!}} \frac{x_3^l}{\sqrt{l!}} \\
 &= \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}), 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k})}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{2(\tilde{k}-\tilde{l})!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}} \\
 &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}}
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

$$\begin{aligned}
 &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l}))!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}}
 \end{aligned} \tag{5.3}$$

$$\begin{aligned}
 &+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1), 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}}
 \end{aligned} \tag{5.4}$$

Mit Hilfe des neuen Parameters

$$L \doteq \tilde{k} - \tilde{l}$$

lässt sich $\tilde{l} = \tilde{k} - L$ in der Summe (5.3) ersetzen:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l}), 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l}))!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}} \\
 &= \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{L=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2L, 2(\tilde{k}-L)+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2L}}{\sqrt{(2L)!}} \frac{x_3^{2(\tilde{k}-L)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-L)+1)!}}
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

Nennt man in der Summe (5.5) L nun wieder \tilde{l} , so wird deutlich, dass die Summen (5.2) und (5.5) durch Vertauschung von $q_2 = 2(\tilde{k} - \tilde{l}) + 1$ und $q_3 = 2\tilde{l}$ ineinander übergehen. Damit ist die Aussage

$$q = (q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{X}_{\text{II}}^{(m)} \iff (q_1, q_3, q_2) \in \mathbb{X}_{\text{III}}^{(m)}$$

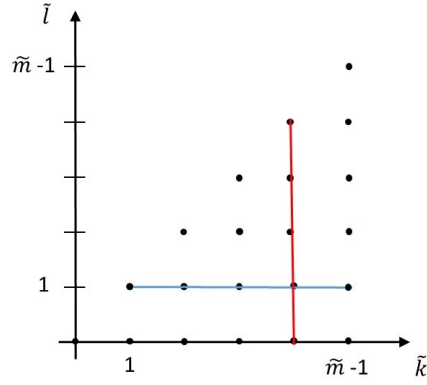


Abbildung 5.1: Änderung der Reihenfolge der Summierung.

bewiesen.

Für den Vergleich der Summen (5.2) und (5.4) muss die Reihenfolge der Summierung geändert werden. Die bisher verwendete Summierung $\sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}}$ ist in Abbildung 5.1 durch den roten Strich angedeutet: \tilde{k} läuft von 0 bis $\tilde{m} - 1$, und für festes \tilde{k} läuft \tilde{l} von 0 bis \tilde{k} .

Nun muss zur durch den blauen Strich angedeuteten Reihenfolge übergegangen werden: \tilde{l} läuft von 0 bis $\tilde{m} - 1$, und für festes \tilde{l} läuft \tilde{k} von \tilde{l} bis $\tilde{m} - 1$. Damit lautet die Summe (5.4):

$$\begin{aligned}
 & \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1), 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}} \\
 = & \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{k}=\tilde{l}}^{\tilde{m}-1} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1), 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l}+1)} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1))!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}+1}}{\sqrt{(2\tilde{l}+1)!}}
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

Ich führe die neuen Parameter

$$\begin{aligned}
 K & \doteq \tilde{m} - \tilde{l} - 1 \\
 L & \doteq \tilde{m} - \tilde{k} - 1
 \end{aligned}$$

ein. Es gilt:

$$\begin{aligned}
 \tilde{k} & = \tilde{m} - L - 1 \\
 \tilde{l} & = \tilde{m} - K - 1 \\
 \tilde{k} - \tilde{l} & = K - L
 \end{aligned}$$

Mit \tilde{l} läuft auch K von 0 bis $\tilde{m} - 1$. Da \tilde{k} von \tilde{l} bis $\tilde{m} - 1$ läuft, läuft L von 0 bis $\tilde{m} - \tilde{l} - 1 = K$. Also ist die Summe (5.6) mit den neuen Parametern gleich

$$\sum_{K=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{L=0}^K a_{(2L, 2(K-L)+1, 2(\tilde{m}-K-1)+1)} \frac{x_1^{2L}}{\sqrt{(2L)!}} \frac{x_2^{2(K-L)+1}}{\sqrt{(2(K-L)+1)!}} \frac{x_3^{2(\tilde{m}-K-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-K-1)+1)!}} \quad (5.7)$$

Nennt man nun in Summe (5.7) K wieder \tilde{k} und L wieder \tilde{l} , so zeigt der Vergleich mit der Summe (5.2)

$$+ \sum_{\tilde{k}=0}^{\tilde{m}-1} \sum_{\tilde{l}=0}^{\tilde{k}} a_{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1, 2(\tilde{k}-\tilde{l})+1, 2\tilde{l})} \frac{x_1^{2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1}}{\sqrt{(2(\tilde{m}-\tilde{k}-1)+1)!}} \frac{x_2^{2(\tilde{k}-\tilde{l})+1}}{\sqrt{(2(\tilde{k}-\tilde{l})+1)!}} \frac{x_3^{2\tilde{l}}}{\sqrt{(2\tilde{l})!}}$$

dass die Summe (5.4) durch die Vertauschung von $q_1 = 2(\tilde{m} - \tilde{k} - 1) + 1$ und $q_3 = 2\tilde{l}$ aus der Summe (5.2) hervorgeht. Damit ist auch die Aussage

$$q = (q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{X}_{\text{II}}^{(m)} \iff (q_3, q_2, q_1) \in \mathbb{X}_{\text{IV}}^{(m)}$$

bewiesen. □

Satz 5.6. *Sei $m \geq 2$ ungerade. Dann haben die Mengen $\mathbb{X}_{\text{I}}^{(m)}$, $\mathbb{X}_{\text{II}}^{(m)}$ und $\mathbb{X}_{\text{III}}^{(m)}$ dieselbe Anzahl Elemente und diese Elemente gehen durch Vertauschung von x mit y und x mit z auseinander hervor:*

$$q = (q_1, q_2, q_3) \in \mathbb{X}_{\text{I}}^{(m)} \iff (q_2, q_1, q_3) \in \mathbb{X}_{\text{II}}^{(m)} \iff (q_3, q_2, q_1) \in \mathbb{X}_{\text{III}}^{(m)}$$

Beweis. Der Beweis wird in Analogie zum Beweis von Satz 5.5 durch eine entsprechende Änderung der Parametrisierung im Beweis von Satz 5.2 erbracht. □

Der folgende Satz besagt, dass sich durch entsprechende Wahl der Basis der Berechnungsaufwand und der Speicherbedarf pro Monomgrad halbieren lässt.

Satz 5.7. *Sei $m \geq 2$ gerade. Dann lässt sich die Reihenfolge der Basismonome so wählen, dass*

$$\Delta_{\text{II}}^{(m, m-2)} = \Delta_{\text{III}}^{(m, m-2)} = \Delta_{\text{IV}}^{(m, m-2)}$$

gilt. Für $m \geq 3$ ungerade lässt sich die Reihenfolge der Basismonome so wählen, dass

$$\Delta_{\text{I}}^{(m, m-2)} = \Delta_{\text{II}}^{(m, m-2)} = \Delta_{\text{III}}^{(m, m-2)}$$

gilt.

Beweis. Dies folgt unmittelbar aus den Sätzen 5.5 und 5.6 und der Invarianz des Laplace-Operators unter Vertauschung der Variablen x , y und z . □

6 Kugelflächenfunktionen und die singulären Vektoren des Laplace-Operators

In diesem Kapitel zeige ich Parallelen zwischen den Eigenwerten und Eigenvektoren von $\Delta^T \Delta$ im Vektorraum der Polynomkoeffizienten und den Kugelflächenfunktionen auf. Ich stelle die Eigenvektoren bis zum Monomgrad $m = 3$, die ich in Abschnitt 4.4 berechnet habe, als Produkte von reellen Kugelflächenfunktionen Y_{l, m_l} und Potenzen von $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ dar. Der Abschnitt 6.4 enthält Überlegungen zu einer sukzessiven Berechnung der Eigenvektoren von $\Delta^T \Delta$ zum Eigenwert Null.

Die Korrelation zwischen den Eigenvektoren von $\Delta^T \Delta$ und den Kugelflächenfunktionen war mir eine entscheidende Hilfe beim Auffinden der Beweise in Abschnitt 4.

6.1 Kugelflächenfunktionen

Die Kugelflächenfunktionen (engl. spherical harmonics) sind auf der Oberfläche einer Kugel mit Radius r , deren Mittelpunkt der Koordinatenursprung ist, definiert und bilden auf der Kugeloberfläche ein vollständiges System orthogonaler Polynome. Sie sind eines der wichtigsten Funktionensysteme der mathematischen Physik (siehe z. B. [15]) und finden in vielen Gebieten von Naturwissenschaft und Technik Anwendung, z. B. bei der Multipol-Entwicklung des elektromagnetischen Feldes und in der Atom- und Molekülphysik.

Ihre Eigenschaften werden in zahlreichen Lehrbüchern der Mathematik und Physik behandelt, z. B. in [8, 15]. In diesem Abschnitt stelle ich die wichtigsten Aussagen zusammen, die ich in diesem Kapitel benötige, und beziehe mich dabei auf [8].

In Kugelkoordinaten (r, θ, ϕ)

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

lautet der Laplace-Operator:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \quad (6.1)$$

Der radiale Anteil wird häufig auch in der folgenden Form geschrieben:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) = \frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\psi}{\partial r}$$

Der Radius r bezeichnet den Abstand zum Koordinatenursprung:

$$r = \|x\| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$$

Lösungen $\psi = \psi(r, \theta, \phi)$ der Laplace-Gleichung $\Delta\psi = 0$, die für beschränktes r beschränkt sind, sind die Funktionen

$$r^l Y_{m_l}^l(\theta, \phi) = r^l C_{l, m_l} P_l^{m_l}(\cos\theta) e^{im_l\phi}$$

Dabei ist l eine ganze, nicht-negative Zahl und m_l nimmt die Werte

$$m_l = -l, -l+1, \dots, 0, 1, \dots, l-1, l$$

an. Zu jedem $l \geq 0$ gibt es also $2l+1$ Funktionen $Y_{m_l}^l$. Die C_{l, m_l} sind Normierungskoeffizienten.

Die Funktionen $P_l^{m_l}$ sind die zugeordneten Legendre-Funktionen. Für $m_l = 0$ reduzieren sie sich auf die Legendre-Polynome P_l von der Ordnung l . Letztere lassen sich nach

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l \quad (6.2)$$

berechnen. Außerdem gilt für sie die folgende rekursive Beziehung:

$$(l+1)P_{l+1}(x) - (2l+1)xP_l(x) + lP_{l-1}(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R} \quad (6.3)$$

mit

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_2(x) &= \frac{1}{2}(3x^2 - 1) \end{aligned}$$

Die $Y_{m_l}^l$ sind die komplexwertigen Kugelflächenfunktionen. Für konstantes r , also auf

der Oberfläche einer Kugel um den Koordinatenursprung mit Radius r , bilden sie ein vollständiges orthonormales Funktionensystem. Die Orthogonalitätsbedingung lautet:

$$\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \overline{Y_{m_l'}^l}(\theta, \phi) Y_{m_l}^l(\theta, \phi) \sim \delta_{l'l} \delta_{m_l', m_l} \quad (6.4)$$

Hier bezeichnet \bar{a} die komplex Konjugierte der komplexen Zahl a .

Aus den Komponenten des Drehimpulsoperators $\mathbf{L} = -i(\mathbf{r} \times \nabla) = (L_x, L_y, L_z)$ werden die sogenannten Auf- und Absteigeoperatoren

$$\begin{aligned} L_+ &= L_x + iL_y \\ L_- &= L_x - iL_y \end{aligned}$$

gebildet. Mit $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ gilt:

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{r^2} \psi$$

sowie

$$\begin{aligned} L^2 Y_{m_l}^l &= l(l+1) Y_{m_l}^l \\ L_+ Y_{m_l}^l &= \sqrt{(l-m_l)(l+m_l+1)} Y_{m_l+1}^l \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$L_- Y_{m_l}^l = \sqrt{(l+m_l)(l-m_l+1)} Y_{m_l-1}^l \quad (6.6)$$

$$L_z Y_{m_l}^l = m_l Y_{m_l}^l \quad (6.7)$$

m_l ist also der zu $Y_{m_l}^l$ gehörende Eigenwert des Drehimpulsoperators L_z . Die Kugelflächenfunktionen zeichnen Drehungen um die z -Achse aus.

Die Lösung des Eigenwertproblems des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten führt auf die Kugelflächenfunktionen $Y_{l, m_l} = Y_{l, m_l}(x, y, z)$ in reeller Form. Sie sind Linearkombinationen der komplexwertigen Kugelflächenfunktionen: Für gegebene Werte m_l und l sind $Y_{m_l}^l$ und $Y_{-m_l}^l$ komplexe Linearkombinationen von Y_{l, m_l} und $Y_{l, -m_l}$ (siehe beispielsweise [23], [24]).

Die ihnen zugeordneten Polynome $r^l Y_{l, m_l}$ sind harmonische homogene Polynome l -ten Grades in x , y und z , d. h. sie sind Summen von Monomen l -ten Grades und werden vom Laplace-Operator auf Null abgebildet:

$$\Delta(r^l Y_{l, m_l}) = 0$$

In diesem Kapitel verwende ich die folgenden reellen Kugelflächenfunktionen:

$$\begin{aligned}
 Y_{0,0} &= 1 & r^2 Y_{2,2} &= x^2 - y^2 \\
 r^1 Y_{1,1} &= x & r^2 Y_{2,1} &= xz \\
 r^1 Y_{1,0} &= z & r^2 Y_{2,0} &= 3z^2 - r^2 \\
 r^1 Y_{1,-1} &= y & r^2 Y_{2,-1} &= yz \\
 & & r^2 Y_{2,-2} &= xy \\
 \\
 r^3 Y_{3,3} &= x(x^2 - 3y^2) \\
 r^3 Y_{3,2} &= (x^2 - y^2)z \\
 r^3 Y_{3,1} &= x(4z^2 - x^2 - y^2) \\
 r^3 Y_{3,0} &= (2z^2 - 3x^2 - 3y^2)z \\
 r^3 Y_{3,-1} &= y(4z^2 - x^2 - y^2) \\
 r^3 Y_{3,-2} &= xyz \\
 r^3 Y_{3,-3} &= (3x^2 - y^2)y
 \end{aligned}$$

6.2 Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ als Polynome

$$r^m Y_{l, m_l}$$

Die zu den Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$, $m \leq 3$, zugehörigen Polynome ergeben sich aus den in Abschnitt 4.4 aufgeführten Eigenvektoren im Vektorraum der Polynomkoeffizienten durch Multiplikation der Koeffizienten mit den Basismonomen $x^q / \sqrt{q!}$ (vgl. Gleichung (2.1)).

Ich zeige in diesem Abschnitt, dass diesen Polynomen Linearkombinationen der im vorigen Abschnitt 6.1 aufgelisteten reellen Kugelflächenfunktionen $r^l Y_{l, m_l}$, multipliziert mit $r^{m-l} = r^{2k}$, k ganzzahlig und nicht-negativ, zugeordnet werden können. Diese Beispiele werden durch den Satz 6.1 verallgemeinert.

Der Raum der Monome nullten Grades, $m = 0$, enthält Konstanten. Sie sind proportional zu $r^0 Y_{0,0} = 1$.

Der Raum der Monome ersten Grades, $m = 1$, ist dreidimensional. Im Vektorraum der Polynomkoeffizienten können seine Basisvektoren als $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ und $(0, 0, 1)$ gewählt

Eigenwert	Polynom	$r^1 Y_{l,m_l}$
0	x	$r^1 Y_{1,1}$
0	y	$r^1 Y_{1,-1}$
0	z	$r^1 Y_{1,0}$

Tabelle 6.1: Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(1)}$ als homogene Polynome ersten Grades mit den zugehörigen harmonischen Polynomen $r^1 Y_{1,m_l}$.

werden (siehe Gleichung (4.11)). Die dazugehörigen Monome

$$\begin{aligned} r^1 Y_{1,1} &= x \\ r^1 Y_{1,-1} &= y \\ r^1 Y_{1,0} &= z \end{aligned}$$

sind auch in Tabelle 6.1 aufgelistet.

Die von mir in Abschnitt 4.4 gewählte Basis des Raums der Monome zweiten Grades, $m = 2$, wird durch die Darstellung

$$\Delta^{(2,0)} = \begin{matrix} & (2,0,0) & (0,2,0) & (0,0,2) & (1,1,0) & (1,0,1) & (0,1,1) \\ (0,0,0) & \left(\begin{array}{cccccc} \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \end{array} \right) \end{matrix}$$

deutlich. In dieser Basis führt der Eigenvektor zum Eigenwert sechs (siehe Gleichung (4.9))

$$e_1^{m=2,\lambda=6} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}$$

auf das Polynom

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{x^2 y^0 z^0}{\sqrt{2!}} + \frac{x^0 y^2 z^0}{\sqrt{2!}} + \frac{x^0 y^0 z^2}{\sqrt{2!}} \right) &= \frac{1}{\sqrt{6}} (x^2 + y^2 + z^2) \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} r^2 \\ &= \frac{1}{\sqrt{6}} r^2 Y_{0,0} \end{aligned}$$

Es ist proportional zu $Y_{0,0}$, dem Basispolynom für $m = 0$, multipliziert mit r^2 .

Auch die fünf Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(2)}$ zum Eigenwert Null,

$$N_{(2)} = \begin{pmatrix} e_1^{m=2,\lambda=0} & e_2^{m=2,\lambda=0} & e_3^{m=2,\lambda=0} & e_4^{m=2,\lambda=0} & e_5^{m=2,\lambda=0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix}$$

(vgl. Gleichung (4.10)) lassen sich durch einfaches Einsetzen als Polynome darstellen. So gilt für $e_1^{m=2,\lambda=0}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{x^2}{\sqrt{2}} - \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{y^2}{\sqrt{2}} &= \frac{1}{2} (x^2 - y^2) \\ &= \frac{1}{2} r^2 Y_{2,2} \end{aligned}$$

und für $e_2^{m=2,\lambda=0}$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{6}} \left(\frac{x^2}{\sqrt{2}} + \frac{y^2}{\sqrt{2}} - 2 \frac{y^2}{\sqrt{2}} \right) &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (x^2 + y^2 - 2z^2) \\ &= \frac{1}{2\sqrt{3}} (r^2 - 3z^2) \\ &= -\frac{1}{2\sqrt{3}} r^2 Y_{2,0} \end{aligned}$$

Alle sechs Polynome für $m = 2$ sind in Tabelle 6.2 zusammengestellt. Die Normierungsfaktoren sind hier irrelevant.

Eigenwert	Eigenvektor	Polynom	$r^2 Y_{l,m_l}$
0	$e_1^{m=2,\lambda=0}$	$x^2 - y^2$	$r^2 Y_{2,2}$
0	$e_2^{m=2,\lambda=0}$	$x^2 + y^2 - 2z^2$	$r^2 Y_{2,0}$
0	$e_3^{m=2,\lambda=0}$	xy	$r^2 Y_{2,-2}$
0	$e_4^{m=2,\lambda=0}$	xz	$r^2 Y_{2,1}$
0	$e_5^{m=2,\lambda=0}$	yz	$r^2 Y_{2,-1}$
6	$e_1^{m=2,\lambda=6}$	$x^2 + y^2 + z^2$	$r^2 Y_{0,0}$

Tabelle 6.2: Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(2)}$ als homogene Polynome zweiten Grades mit den zugehörigen harmonischen Polynomen $r^2 Y_{2,m_l}$ sowie $r^2 Y_{0,0}$.

Bemerkung 6.1. Ich habe die Eigenvektoren $e_j^{m=2,\lambda=0}$ in Tabelle 6.2 so gewählt, dass die Funktionen $r^2 Y_{2,m_l}$ reproduziert werden. Da letztere definierte Symmetrieeigenschaften bzgl. Drehungen um die z -Achse haben, sind die Polynome nicht invariant unter Vertauschung der Variablen x , y und z .

Den Laplace-Operator $\Delta^{(3,1)}$ im Raum der Monome $m = 3$ -ten Grades habe ich in Abschnitt 4.4 als 3×10 -Matrix

$$\Delta^{(3,1)} = \begin{matrix} & (3,0,0) & (1,2,0) & (1,0,2) & (2,1,0) & (0,3,0) & (0,1,2) & (2,0,1) & (0,2,1) & (0,0,3) & (1,1,1) \\ \begin{matrix} (1,0,0) \\ (0,1,0) \\ (0,0,1) \end{matrix} & \begin{pmatrix} \sqrt{6} & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{2} & \sqrt{2} & \sqrt{6} & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \end{matrix}$$

dargestellt. Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(3)}$ zum Eigenwert 10 sind

$$E_{(3)} = \begin{pmatrix} e_1^{m=3,\lambda=10} & \cdot & \cdot \\ \cdot & e_2^{m=3,\lambda=10} & \cdot \\ \cdot & \cdot & e_3^{m=3,\lambda=10} \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}$$

(vgl. Gleichung (4.12)). Ich berechne exemplarisch den Spaltenvektor $e_3^{m=3,\lambda=10}$ als Polynom. Es gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{x^2 z}{\sqrt{2}} + \frac{y^2 z}{\sqrt{2}} + \sqrt{3} \frac{z^3}{\sqrt{3!}} \right) &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{x^2}{\sqrt{2}} + \frac{y^2}{\sqrt{2}} + \frac{z^2}{\sqrt{2}} \right) z \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} r^2 z \\ &= \frac{1}{\sqrt{10}} r^3 Y_{1,0} \end{aligned}$$

Die sieben Eigenvektoren zum Eigenwert Null, die die Spalten der 10×7 -Matrix $N_{(3)}$ bilden, habe ich als

$$N_{(3)} = \begin{pmatrix} e_1^{m=3,\lambda=0} & e_2^{m=3,\lambda=0} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & e_3^{m=3,\lambda=0} & e_4^{m=3,\lambda=0} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & e_5^{m=3,\lambda=0} & e_6^{m=3,\lambda=0} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & e_7^{m=3,\lambda=0} \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} \cdot & -2 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -2 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -\sqrt{5} & \sqrt{3} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & -2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix}$$

gewählt (vgl. Gleichung (4.13)). Ich berechne den Eigenvektor $e_5^{m=3,\lambda=0}$ als Polynom. Es gilt:

$$\begin{aligned} \sqrt{5} \left(\frac{x^2 z}{\sqrt{2}} - \frac{y^2 z}{\sqrt{2}} \right) &= \sqrt{10} (x^2 - y^2) z \\ &= \sqrt{10} r^3 Y_{3,2} \end{aligned}$$

Für die Darstellung des Eigenvektors $e_6^{m=3,\lambda=0}$ als Polynom gilt:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{10}} \left(\sqrt{3} \frac{x^2 z}{\sqrt{2}} + \sqrt{3} \frac{y^2 z}{\sqrt{2}} - 2 \frac{z^3}{\sqrt{3!}} \right) &= \frac{1}{\sqrt{10}} \left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} (x^2 + y^2) z - 2 \frac{z^3}{\sqrt{3!}} \right) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{20}} \left(x^2 + y^2 - \frac{2}{3} z^2 \right) z \\ &= -\frac{1}{\sqrt{60}} r^3 Y_{3,0} \end{aligned}$$

Eigenwert	Eigenvektor	Polynom	$r^3 Y_{l,m_l}$
0	$e_1^{m=3,\lambda=0}$	$x(y^2 - z^2)$	$r^3 Y_{3,3} + r^3 Y_{3,1}$
0	$e_2^{m=3,\lambda=0}$	$x(-2x^2 + 3y^2 + 3z^2)$	$5r^3 Y_{3,3} - 3r^3 Y_{3,1}$
0	$e_3^{m=3,\lambda=0}$	$y(x^2 - z^2)$	$r^3 Y_{3,-3} - r^3 Y_{3,-1}$
0	$e_4^{m=3,\lambda=0}$	$y(3x^2 - 2y^2 + 3z^2)$	$5r^3 Y_{3,-3} + 3r^3 Y_{3,-1}$
0	$e_5^{m=3,\lambda=0}$	$(x^2 - y^2)z$	$r^3 Y_{3,2}$
0	$e_6^{m=3,\lambda=0}$	$(3x^2 + 3y^2 - 2z^2)z$	$r^3 Y_{3,0}$
0	$e_7^{m=3,\lambda=0}$	xyz	$r^3 Y_{3,-2}$
10	$e_1^{m=3,\lambda=10}$	$r^2 x$	$r^3 Y_{1,1}$
10	$e_2^{m=3,\lambda=10}$	$r^2 y$	$r^3 Y_{1,-1}$
10	$e_3^{m=3,\lambda=10}$	$r^2 z$	$r^3 Y_{1,0}$

Tabelle 6.3: Die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(3)}$ als homogene Polynome dritten Grades mit den zugehörigen harmonischen Polynomen $r^3 Y_{3,m_l}$ sowie den Polynomen $r^3 Y_{1,m_l}$.

Wie Tabelle 6.3 zeigt, sind die sieben ($7 = 2 * 3 + 1$) Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(3)}$ zum Eigenwert Null als Polynome Linearkombinationen der Polynome $r^3 Y_{3, m_l}$. Bei Bedarf lassen sich natürlich auch Linearkombinationen der sieben Eigenvektoren $e_j^{m=3, \lambda=0}$ berechnen, die gleich den $r^3 Y_{3, m_l}$ sind. Die drei ($3 = 2 * 1 + 1$) Eigenvektoren zum Eigenwert 10 sind als Polynome dargestellt die Polynome $r^3 Y_{1, m_l}$. In diesem Zusammenhang beachte man auch meine obige Bemerkung 6.1.

Die oben aufgeführten Vektoren und Polynome sind Beispiele des folgenden Satzes (Corollary 1.8 in [3]).

Es seien p_j harmonische homogene Polynome, d. h. es gelte $\Delta p_j = 0$ und p_j ist eine Summe von Monomen j -ten Grades. Dann gilt:

Satz 6.1. *Sei p ein homogenes Polynom m -ten Grades mit $m = 2\tilde{m}$ oder $m = 2\tilde{m} + 1$. Dann gibt es harmonische homogene Polynome p_j , so dass sich p eindeutig als*

$$p = p_m + r^2 p_{m-2} + \dots + r^{2\tilde{m}} p_{m-2\tilde{m}}$$

darstellen lässt.

Beweis. Bezüglich des Beweises verweise ich auf [3]. □

6.3 Zur inversen Wirkung des Laplace-Operators

In Kapitel 4 habe ich gezeigt, dass die Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m+2)}$ zu von Null verschiedenen Eigenwerten sukzessive aus den Eigenvektoren von $(\Delta^T \Delta)^{(m)}$ berechnet werden können. Die Beispiele in Abschnitt 6.2 lassen vermuten, dass dieser Übergang von m zu $m + 2$ im Wesentlichen durch die Multiplikation mit r^2 bewirkt wird.

Diese Vermutung wird durch das folgende Lemma 6.1 motiviert und ist im Satz 4.5 im Abschnitt 4.6 bewiesen.

Lemma 6.1. *Sei $l \geq 0$ und $m \geq l + 2$. Dann gilt:*

$$\Delta (r^m Y_{l, m_l}) = (m - l)(m - l + 1) r^{m-2} Y_{l, m_l}$$

Der Faktor $(m - l)(m - l + 1)$ ist unabhängig von m_l .

Beweis. Mit der Darstellung (6.1) des Laplace-Operators und $\Delta(r^l Y_{l,m_l}) = 0$ gilt:

$$\begin{aligned}
 \Delta(r^m Y_{l,m_l}) &= \Delta(r^{m-l} r^l Y_{l,m_l}) \\
 &= (\Delta r^{m-l}) r^l Y_{l,m_l} + r^{m-l} (\Delta r^l Y_{l,m_l}) \\
 &= r^l Y_{l,m_l} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial r^{m-l}}{\partial r} \right) \\
 &= r^l Y_{l,m_l} (m-l) \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^{m-l+1} \\
 &= r^l Y_{l,m_l} (m-l)(m-l+1) r^{m-l-2} \\
 &= (m-l)(m-l+1) r^{m-2} Y_{l,m_l}
 \end{aligned}$$

Der Faktor $(m-l)(m-l+1)$ hängt von m und l ab, aber nicht von m_l . □

Bei Anwendung auf ein Polynom $r^m Y_{l,m_l}$ verringert der Laplace-Operator also den Exponenten von r um 2. Die Wirkung der umgekehrten Anwendung ist folglich u. a. eine Multiplikation mit r^2 . Dies hat mich in Abschnitt 4.6 veranlasst, die Multiplikation eines Polynoms mit r^2 im Vektorraum der Polynomkoeffizienten zu untersuchen.

6.4 Zur rekursiven Berechnung der $r^l Y_{l,m_l}$

Im Kapitel 4 über die sukzessive Berechnung der singulären Vektoren des Laplace-Operators ist offengeblieben, ob $N_{(m+2)}$ aus $N_{(m)}$ berechnet werden kann (siehe Abschnitt 4.3).

In diesem Abschnitt skizziere ich eine Möglichkeit der sukzessiven Berechnung, die sich aus der Theorie der Kugelflächenfunktionen (siehe Abschnitt 6.1) ergibt und den Eigenvektoren zum Eigenwert Null definierte Symmetrieeigenschaften zuschreibt. Allerdings erfordert dieses Verfahren, zum Zweck der Berechnung von den reellwertigen zu den komplexwertigen Kugelflächenfunktionen überzugehen.

Nach den Ausführungen der vorherigen Abschnitte stellt sich hier die Aufgabe, die Kugelflächenfunktionen $Y_{m_l}^{l+1}$ aus den Funktionen $Y_{m_l}^l$ und $Y_{m_l}^{l-1}$ zu berechnen.

Für $m_l = 0$ reduziert sich $Y_{m_l}^l$ auf das Legendre-Polynom P_l der Ordnung l . Nach Gleichung (6.3)

$$(l+1)P_{l+1}(x) - (2l+1)xP_l(x) + lP_{l-1}(x) = 0, \quad x \in \mathbb{R}$$

lässt sich daher $Y_{m_l=0}^{l+1}$ aus $Y_{m_l=0}^l$ und $Y_{m_l=0}^{l-1}$ berechnen. Alternativ kann man $Y_{m_l=0}^{l+1}$ auch

direkt nach Gleichung (6.2) berechnen:

$$P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l$$

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, den Operator L_z als Operator im Vektorraum der Polynomkoeffizienten zu formulieren und durch Lösen des linearen Gleichungssystems für jeden Monomgrad m seinen Eigenvektor zum Eigenwert $m_l = 0$ zu bestimmen (vgl. Gleichung (6.7)):

$$L_z Y_{m_l} = m_l Y_{m_l}$$

Die übrigen Kugelflächenfunktionen $Y_{m_l \neq 0}^{l+1}$ ergeben sich dann nach den Gleichungen (6.5) und (6.6) durch Anwendung der Auf- und Absteigeoperatoren L_{\pm} auf $Y_{m_l=0}^{l+1}$:

$$\begin{aligned} L_+ Y_{m_l}^l &= \sqrt{(l - m_l)(l + m_l + 1)} Y_{m_l+1}^l \\ L_- Y_{m_l}^l &= \sqrt{(l + m_l)(l - m_l + 1)} Y_{m_l-1}^l \end{aligned}$$

7 Ergebnisse und Ausblick

In diesem abschließenden Kapitel fasse ich die entscheidenden Ergebnisse der vorliegenden Arbeit am Beispiel der Poisson-Gleichung zusammen und skizziere anschließend am Beispiel einer angeströmten Ecke meine Vorarbeiten zu den notwendigen weiteren Entwicklungen des Polynomansatzes zur Lösung partieller Differentialgleichungen.

7.1 Ergebnisse

Sei φ ein zeitunabhängiges Polynom. Gesucht sei die Lösung ϕ der Poisson-Gleichung

$$\Delta \phi = \varphi$$

Die entsprechende Darstellung im Vektorraum der Polynomkoeffizienten lässt sich nach Satz 4.2 invertieren:

$$\phi_{m+2} = (\Delta^{(m+2,m)})^\dagger \varphi_m + \phi_{m+2,0}, \quad m \geq 0$$

φ_m ist der Koeffizientenvektor von φ im Vektorraum der Monome vom Grad m und ϕ_{m+2} ist der von ϕ im Vektorraum der Monome vom Grad $m+2$.

Für die Anteile $\phi_{m+2,0}$ der gesuchten Lösung gilt:

$$\Delta^{(m+2,m)} \phi_{m+2,0} = 0$$

Sie sind hier nicht eindeutig bestimmbar. Zusätzlich enthält die Lösung noch beliebig wählbare Beiträge $\phi_{0,0}$ und $\phi_{1,0}$ in den Vektorräumen der Monome von Grad $m=0$ und $m=1$.

Die Darstellung der Moore-Penrose-Inversen im Vektorraum der Polynomkoeffizienten selber ist auch nicht eindeutig definiert, da die Singulärwertzerlegung nicht eindeutig ist. Dies äußert sich bei der Wahl $U_{(m+2)} = V_{(m)}$ in Korollar 4.2 (e), insbesondere bei der Wahl der Spaltenvektoren von $N_{(m)}$ in der Matrix $V_{(m)} = (E_{(m)} N_{(m)})$ (siehe die Bemerkung am Ende des Abschnitts 4.3). Diese Freiheit kann genutzt werden, um spezielle,

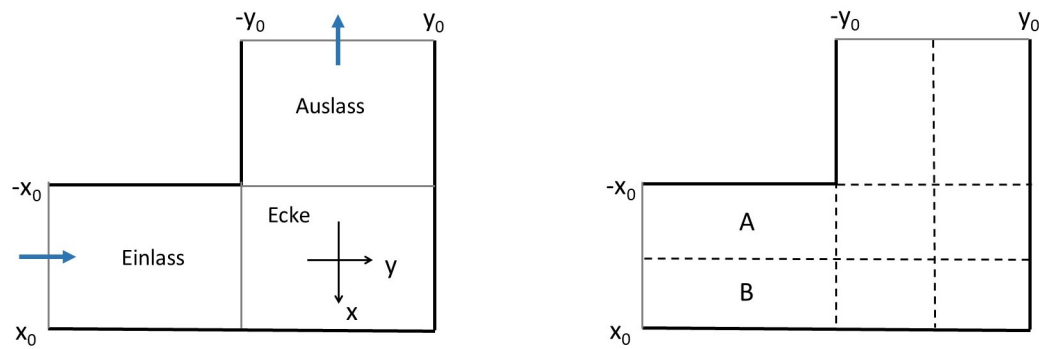


Abbildung 7.1: Angeströmte Ecke mit Einlass- und Auslasskanal (links) und der Aufteilung des Berechnungsgebietes in acht Teilgebiete (rechts).

an die Fragestellung angepasste Basisvektoren zu definieren. Beispielsweise haben die Kugelflächenfunktionen wohldefinierte Symmetrieeigenschaften (vgl. Kapitel 6).

7.2 Zur Lösung zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen mit Randbedingungen

Um eindeutige Lösungen der Differentialgleichungen zu erhalten, müssen geeignete Randbedingungen definiert werden, die der Fragestellung entsprechen und gleichzeitig auch für den in dieser Arbeit vorgestellten Polynomansatz geeignet sind.

Abbildung 7.1 zeigt das Beispiel einer angeströmten Ecke mit Einlass- und Auslasskanal. Dargestellt ist ein Schnitt parallel zur x - y -Ebene durch einen Kanal mit rechteckigem Querschnitt.

Der Kanal ist durch Wände begrenzt, an denen das Fluid haftet und somit die drei Komponenten der Geschwindigkeit gleich Null sind (Dirichlet-Randbedingungen). Beispielsweise wird der Einlasskanal durch zwei Wände parallel zur y - z -Ebene durch $x = x_0$ und $x = -x_0$ sowie zwei in Abbildung 7.1 nicht dargestellte Wände parallel zur x - y -Ebene durch $z = z_0$ und $z = -z_0$ begrenzt.

Ein Polynom $p_{B,j}$ der Form

$$p_{B,j}(x, y, z) = (x - x_0) p'_{B,j}(x, y, z)$$

ist für $x = x_0$ identisch Null und erfüllt somit die Dirichlet-Randbedingung Null an

der Wand parallel zur y - z -Ebene durch $x = x_0$ im Gebiet B in Abbildung 7.1 rechts. Hier ist $p'_{B,j}$ zunächst ein beliebiges Polynom, das aber u. U. weitere Randbedingungen erfüllen muss. Diese Polynome $p_{B,j}$ spannen einen Untervektorraum des Raums aller Polynome auf. Auf ähnliche Weise können auch Polynome definiert werden, die an den Wänden Neumann-Randbedingungen erfüllen und dadurch geeignet sind, das Druckfeld der Navier-Stokes-Gleichungen zu approximieren.

Meine Idee ist nun, geeignete Ansatz-Polynome $p'_{B,j}$ zu definieren und Linearkombinationen

$$\sum_j p_{B,j} L_{B,j} \tag{7.1}$$

als Ansatz für die gesuchten Komponenten der Geschwindigkeit im Gebiet B, die für $x = x_0$ identisch Null sein sollen, zu wählen. Dabei sind die $L_{B,j}$ reelle Parameter, die im Zuge der Lösung der Differentialgleichung bestimmt werden müssen.

Diese Idee ermöglicht es, Unterräume des Vektorraums der Polynomkoeffizienten, in denen die gesuchte Lösung enthalten sein muss, zu definieren und mit den Mitteln der Linearen Algebra zu untersuchen. Beispielsweise können diese Räume mit den von den Spaltenvektoren der Matrizen $N_{(m)}$ und $E_{(m)}$, $m \geq 0$, aufgespannten Unterräumen verglichen bzw. ihre Schnittmengen untersucht werden.

Eine nähere Betrachtung zeigt aber auch, dass ein einziges Polynom mit dem Ansatz (7.1) nicht ausreicht, um die Kanalströmung in Abbildung 7.1 zu beschreiben. Der Ansatz (7.1) ist für die im Gebiet B (siehe Abbildung 7.1 rechts) gesuchte Lösung geeignet. Für das Gebiet A muss dagegen ein Ansatz

$$\sum_j p_{A,j} L_{A,j}$$

mit Polynomen der Form

$$p_{A,j}(x, y, z) = (x + x_0) p'_{A,j}(x, y, z)$$

gewählt werden, da diese an der Wand parallel zur y - z -Ebene durch $x = -x_0$ identisch Null sind und somit hier die Dirichlet-Randbedingung Null erfüllen. $p'_{A,j}$ ist bis auf die Forderung, dass evtl. weitere Randbedingungen berücksichtigt werden müssen, frei wählbar.

Die Forderung, dass die in den Gebieten A und B definierten Polynome auf der Grenzfläche zwischen A und B stetig und bis beispielsweise zur zweiten Ordnung stetig differenzierbar sind, führt auf ein lineares Gleichungssystem mit den Parametern $L_{A,j}$ und $L_{B,j}$ als Unbekannte.

Es wäre grundsätzlich möglich, die Gebiete A und B zu vereinigen und im gesamten Gebiet A+B Polynome der Form

$$p_{A+B,j}(x, y, z) = (x - x_0)(x + x_0) p'_{A+B,j}(x, y, z)$$

zu verwenden, da diese gleichzeitig an beiden Wänden $x = \pm x_0$ die Dirichlet-Randbedingung Null erfüllen. Eine genauere Untersuchung zeigt aber, dass dieser Ansatz den Lösungsraum zu stark einschränkt. Beispielsweise enthält die analytische Lösung für die laminare Strömung in einem unendlich langen Kanal mit rechteckigem Querschnitt trigonometrische Funktionen und Hyperbelfunktionen [4] und ist folglich nicht als Polynom darstellbar, sondern lediglich durch Polynome approximierbar.

Zusätzlich zu den oben definierten Polynomen $p_{A,j}$ und $p_{B,j}$ werden noch weitere Polynome mit geeigneten Ansätzen benötigt, um das Gebiet der Ecke und den Auslasskanal zu beschreiben (siehe Abbildung 7.1 rechts). Unter Berücksichtigung der Ausdehnung des Kanals in z -Richtung ergibt sich somit, dass 16 Polynome benötigt werden, um eine Geschwindigkeitskomponente zu beschreiben. Diese 16 Polynome sind über die Differenzierbarkeitsbedingungen auf den Grenzflächen zwischen den 16 Teilgebieten gekoppelt.

Für die Beschreibung der zweiten und der dritten Geschwindigkeitskomponente benötigt man insgesamt $2 \cdot 16 = 32$ weitere Polynome der oben beschriebenen Formen. Formuliert man die Forderung nach Divergenzfreiheit (siehe Gleichung 1.1 im Abschnitt 1.2) im Vektorraum der Polynomkoeffizienten, so erhält man weitere lineare Bedingungen, die von den Parametern L aller 48 Polynome erfüllt werden müssen. Auf diese Weise wird ein Untervektorraum für inkompressible Strömungen, die an den Wänden haften, definiert, in dem die gesuchte Lösung der Navier-Stokes-Gleichung enthalten sein muss.

Das Beispiel der angeströmten Ecke mit Ein- und Auslasskanal zeigt, dass der Polynomansatz zur Lösung partieller Differentialgleichungen in Bezug auf die Geometrie der Ränder weniger flexibel als die bekannten Standard-Verfahren ist. Gekrümmte Flächen, auf denen Randbedingungen erfüllt werden müssen, können grundsätzlich auch beschrieben werden, ihre Behandlung ist aber deutlich aufwendiger als die der ebenen Flächen. Im Gegenzug dazu ist der Polynomansatz für die Untersuchung von turbulenten Strömungen, besonders in Wandnähe, durch seinen halb analytischen, halb numerischen Ansatz sehr gut geeignet.

Abschließend gehe ich noch kurz auf zeitabhängige Differentialgleichungen ein, für die zeitabhängige Lösungen gefunden werden müssen. Die Zeitabhängigkeit der Polynome, die die gesuchte Lösung approximieren, führt auf zeitabhängige Polynomkoeffizienten $a_q(t)$. Im Allgemeinen können nun diese Polynomkoeffizienten als Polynom in der Zeit t entwick-

elt werden:

$$a_q(t) = \sum_{n=0}^N a_{q,n} \frac{t^n}{\sqrt{n!}}$$

Im Falle eines Ansatzes der Form (7.1) mit zeitunabhängigen Randbedingungen werden die Parameter $L_{B,j}$ zeitabhängig und werden als Polynome

$$L_{B,j}(t) = \sum_{n=0}^N L_{B,j,n} \frac{t^n}{\sqrt{n!}}$$

entwickelt. Die Formulierung der zu lösenden Differentialgleichung im Vektorraum der Polynomkoeffizienten führt dann auf lineare Gleichungssysteme mit den Koeffizienten $a_{q,n}$ bzw. $L_{B,j,n}$ als Unbekannte.

Mit der kurzen Präsentation meiner Ideen am Beispiel der angeströmten Ecke habe ich gezeigt, dass sich mit Hilfe geeigneter Ansatz-Polynome, die die Randbedingungen erfüllen, interessante Möglichkeiten zur Analyse der Lösungsräume ergeben. Die detaillierte Ausarbeitung und Bewertung dieses Ansatzes übersteigt den Rahmen der vorliegenden Arbeit und wird woanders präsentiert werden.

Literaturverzeichnis

- [1] Sebastian Reiter et al. “A massively parallel geometric multigrid solver on hierarchically distributed grids”. In: *Computing and Visualization in Science* 16 (2013), 151–164. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00791-014-0231-x>.
- [2] Stephen P. Booth et al. *CRESTA Deliverable D4.1.1 – Overview of major limiting factors of existing algorithms and libraries (2012)*. http://www.cresta-project.eu/images/docs/deliverables/D4.1.1_Overview_of_major_limiting_factors_of_existing_algorithms_and_libraries.pdf. Abgerufen am 23.01.2023.
- [3] Sheldon Axler and Wade Ramey. “Harmonic polynomials and Dirichlet-type problems”. In: *Proc. Amer. Math. Soc.* 123 (1995), pp. 3765–3773. DOI: <https://doi.org/10.1090/S0002-9939-1995-1277092-1>.
- [4] R. J. Cornish. “Flow in a Pipe of Rectangular Cross-Section”. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Volume 120* (1928), pp. 691–700. DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1928.0175>.
- [5] Massimiliano Culpo. *Current Bottlenecks in the Scalability of OpenFOAM on Massively Parallel Clusters*. 2012. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.807482>.
- [6] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations*. Fourth edition. Baltimore: The Johns Hopkins University Press, 2013.
- [7] R. I. Issa. “Solution of the Implicitly Discretized Fluid Flow Equation by Operator Splitting”. In: *Journal of Computational Physics* 62 (1986), 40–65.
- [8] John David Jackson. *Classical Electrodynamics*. 3rd Edition. John Wiley & Sons, Inc., 1998.
- [9] Uwe Küster. *Mündliche Diskussion*. High Performance Computing Center Stuttgart (HLRS).
- [10] Uwe Küster. *Polynome auf mehrdimensionalen Räumen*. Nicht veröffentlicht. 2020.
- [11] F. Moukalled, L. Mangani, and M. Darwish. *The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics - An Advanced Introduction with OpenFOAM® and Matlab®*. Fluid Mechanics and Its Applications, Volume 113. Springer, 2016.

- [12] S. V. Patankar. *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. Hemisphere Publishing Corp., Washington, 1980.
- [13] S. V. Patankar and D. B. Spalding. “A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows”. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* 15 (1972), pp. 1787–1806. DOI: [http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310\(72\)90054-3](http://dx.doi.org/10.1016/0017-9310(72)90054-3).
- [14] Anthony T. Patera. “A spectral element method for fluid dynamics: Laminar flow in a channel expansion”. In: *Journal of Computational Physics* 54.3 (1984), pp. 468–488. ISSN: 0021-9991. DOI: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(84\)90128-1](https://doi.org/10.1016/0021-9991(84)90128-1).
- [15] Arnold Sommerfeld. *Vorlesungen über Theoretische Physik, Band VI, Partielle Differentialgleichungen der Physik*. Thun, Frankfurt/M.: Verlag Harri Deutsch, 1992.
- [16] Gilbert Strang. *Introduction to Linear Algebra*. Second edition. Wellesley MA: Wellesley-Cambridge Press, 1998.
- [17] H. K. Versteeg and W. Malalasekera. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. Second Edition. Pearson, Prentice Hall, Harlow, 2007.
- [18] Hermann Weyl. *The Theory of Groups and Quantum Mechanics*. New York: Dover Publications, Inc., 1950.
- [19] Wikipedia. *Finite element method*. https://en.wikipedia.org/wiki/Finite_element_method. Abgerufen am 23.01.2023.
- [20] Wikipedia. *Moore–Penrose inverse*. https://en.wikipedia.org/wiki/Moore-Penrose_inverse. Abgerufen am 23.01.2023.
- [21] Wikipedia. *Singular value decomposition*. https://en.wikipedia.org/wiki/Singular_value_decomposition. Abgerufen am 23.01.2023.
- [22] Wikipedia. *Spectral element method*. https://en.wikipedia.org/wiki/Spectral_element_method. Abgerufen am 23.01.2023.
- [23] Wikipedia. *Spherical harmonics*. https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_harmonics. Abgerufen am 23.01.2023.
- [24] Wikipedia. *Table of spherical harmonics*. https://en.wikipedia.org/wiki/Table_of_spherical_harmonics. Abgerufen am 23.01.2023.

Eigenständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, das ich die vorliegende Dissertation mit dem Thema „Über die Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen mit Hilfe der Moore-Penrose-Inversen des Laplace-Operators im Vektorraum der Polynomkoeffizienten“ selbständig und ohne unerlaubte fremde Hilfe angefertigt habe. Es wurden von mir ausschließlich die angegebenen Quellen und Hilfen in Anspruch genommen.

Bärbel Große-Wöhrmann

Stuttgart, 23. Januar 2023