

ANDREAS ZEISER

Direkte Diskretisierung der Schrödinger-
gleichung auf dünnen Gittern



Technische Universität Berlin

Direkte Diskretisierung der Schrödingergleichung auf dünnen Gittern

vorgelegt von

Diplom-Physiker
Andreas Martin Zeiser
aus Augsburg

Von der Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Naturwissenschaften
Dr. rer. nat.

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Ph.D. John Sullivan
Berichter: Prof. Dr. rer. nat. Harry Yserentant
Berichter: Prof. Dr. rer. nat. Helmut Harbrecht

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 15. September 2010

Berlin 2010

D83

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	v
Bezeichnungen	v
Kapitel 1. Einleitung	1
Teil 1. Galerkinverfahren auf dünnen Gittern	9
Kapitel 2. Approximation hochdimensionaler Funktionen	11
1. Problemstellung	12
2. Isotrope Sobolevregularität	12
3. Gemischte Regularität	15
Kapitel 3. Gewichtete Sobolevräume	19
1. Definition	19
2. Fourierdarstellung ungewichteter Normen	22
3. Lokalisierte Normen	24
Kapitel 4. Wavelet Entwicklung und diskrete Normen	29
1. Notation und Voraussetzungen	30
2. Der ungewichtete Fall	31
3. Der gewichtete Fall	33
Kapitel 5. Approximation durch Wavelets	37
1. Exponentiell gewichtete Sobolevräume	38
2. Allgemeine Dünngitterräume	39
3. Dünnes Gitter in Ort und Stufe	40
4. Approximation auf einem endlichen Gebiet	44
5. Approximation durch vollständig anisotrope Basen	47
Kapitel 6. Galerkin Methode auf dünnen Gittern	49
1. Problemstellung und Approximationsresultate	49
2. Präkonditionierung und Iterationsverfahren	51
3. Eigenwertprobleme	52
Kapitel 7. Algorithmen auf dünnen Gittern	55
1. Reduktion der Dimensionen	56
2. Tensorproduktoperatoren	56
3. Algorithmus von Schwab und Todor	57
4. Unidirektionaler Algorithmus	58
5. Mehrskalener Algorithmus	61
6. Modellfall	63
7. Numerisches Beispiel	65

Teil 2. Die elektronische Schrödingergleichung	67
Kapitel 8. Die Schrödingergleichung	69
1. Der Hamiltonoperator	69
2. Antisymmetrie	71
3. Eigenwertprobleme	73
Kapitel 9. Eigenschaften des Spektrums und der Eigenfunktionen	77
1. Spektraleigenschaften	77
2. Eigenschaften der Eigenfunktionen	78
3. Existenz exponentiell gewichteter gemischter Ableitung	79
Kapitel 10. Approximation antisymmetrischer Funktionen	83
1. Bestapproximation von antisymmetrischen Funktionen	83
2. Antisymmetrische dünne Gitter	84
Kapitel 11. Galerkindiskretisierung der Schrödingergleichung	89
1. Konstruktion einer Basis auf antisymmetrischen dünnen Gittern	89
2. Berechnung der Matrixelemente	91
3. Präkonditionierung	95
4. Komplexität der Diskretisierungsmatrix	96
Teil 3. Numerische Experimente	99
Kapitel 12. Approximation des Newtonpotentials	101
1. Störung des Potentials	101
2. Exponentialsummen	105
Kapitel 13. Numerische Behandlung des Heliumatoms	109
1. Diskretisierung des Heliumatoms	109
2. Diskretisierungsmatrizen	111
3. Berechnung der Matrixelemente	112
4. Numerische Ergebnisse	114
Anhang A. Reelle Interpolation	117
Anhang B. Tensorräume und gemischte Ableitungen	121
Literaturverzeichnis	125

Bezeichnungen

Symbole

$\lceil s \rceil, \lfloor s \rfloor$	Kleinste ganze Zahl $n \in \mathbb{N}$ mit $n \geq s$, bzw. größte mit $n \leq s$
$\ \cdot\ _p$	ℓ^p -Norm
$\#A$	Mächtigkeit, Aufwand oder Anzahl der Einträge
$a \lesssim b$	$a \leq C b$, wobei C eine nicht näher spezifizierte Konstante ist
$a \sim b$	$a \lesssim b$ und $b \lesssim a$
\hat{u}	Fouriertransformierte von u , Gl. (3.5)

Sobolevräume und Normen

$H^s(\Omega, w)$	gewichteter Sobolevraum, Gl. (3.3)
$\langle \cdot, \cdot \rangle_m$	Skalarprodukt des Sobolevraums H^m
$\ \cdot\ _m$	Norm des Sobolevraums H^m
$H_{\text{mix}}^{s,m}(\Omega, w)$	gewichteter Sobolevraum gemischter Ordnung, Def. 3.1 und 3.2
$\langle \cdot, \cdot \rangle_{\text{mix},w,s,m,\Omega}$	Skalarprodukt des Sobolevraums $H_{\text{mix}}^{s,m}(\Omega, w)$
$\ \cdot\ _{\text{mix},w,s,m,\Omega}$	Norm des Sobolevraums $H_{\text{mix}}^{s,m}(\Omega, w)$
$\ \ \cdot\ \ _{\text{mix},w,s,m,\Omega}$	lokalisierte Norm des Sobolevraums $H_{\text{mix}}^{s,m}(\Omega, w)$, Gl. (3.6)
w_γ	exponentielle Gewichtsfunktion, Gl. (5.1)

Wavelets

$\lambda = (\varepsilon, j, \mathbf{k})$	Waveletindex λ mit Typ ε , Stufe j und Translation \mathbf{k} , Gl. (4.1)
$j(\lambda) = \lambda $	Stufe von λ , Gl. (4.3)
∇	Menge der Waveletindizes in d Variablen, Gl. (4.4)
$\psi_\lambda, \tilde{\psi}_\lambda$	primales, bzw. duales Wavelet in d Variablen, Seite 30
ξ	Radius des Trägers der primalen und dualen Wavelets, Gl. (4.5)
\mathbf{x}_λ	Aufpunkt von ψ_λ und $\tilde{\psi}_\lambda$, Gl. (4.2)
$\psi_{\vec{\lambda}}, \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}$	primales, bzw. duales Wavelet in dN Variablen, Gl. (4.10)
$\vec{\mathbf{x}}_{\vec{\lambda}}$	Aufpunkt von $\psi_{\vec{\lambda}}$ und $\tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}$, Gl. (4.15)
$\vec{j}(\vec{\lambda})$	Stufenvektor von $\vec{\lambda}$, Gl. (4.11)
τ	Grenze der Normäquivalenz, Gl. (4.7)
$\kappa_{\text{iso/mix}}, \kappa_{s,m}$	Gewichte der diskreten Norm, Def. 4.2

Schrödingergleichung und Wellenfunktionen

$\mathcal{H}^m(N)$	Sobolevraum für Wellenfunktionen, Def. 8.1
\mathcal{R}_N	Repräsentanten der Spinkonfigurationen, Lemma 8.3
$H_{\vec{\sigma}}^m((\mathbb{R}^d)^N)$	Sobolevraum partiell antisymmetrischer Funktionen, Def. 8.5
H	Hamiltonoperator, Gl. (8.4)
$A, A_{\vec{\sigma}}$	Antisymmetrisierungsoperatoren, Gl. (8.7) und Gl. (10.1)

KAPITEL 1

Einleitung

Virtuelle Labore ersetzen in der Chemie mehr und mehr Experimente und werden zur Vorhersage von Eigenschaften neuer Verbindungen verwendet. Die Basis der Simulation und damit der mathematischen Beschreibung ist die vor mehr als 80 Jahren von Schrödinger eingeführte Quantenmechanik (Schrödinger, 1926). Gemäß dieses Modells kann das Verhalten eines quantenmechanischen Systems mitsamt aller physikalischen Eigenschaften vollständig durch eine Wellenfunktion beschrieben werden. Die Wellenfunktion ist dabei die Lösung einer partiellen Differentialgleichung, der Schrödingergleichung, welche jedoch nur in den einfachsten Fällen analytisch bestimmt werden kann. Aus diesem Grund müssen im Allgemeinen numerische Verfahren verwendet werden um Näherungslösungen zu berechnen. Die vorliegende Arbeit untersucht die Diskretisierung der stationären Schrödingergleichung für Moleküle mit Hilfe der Galerkin-Methode. Dabei werden anisotrope Waveletbasen als Ansatzfunktionen verwendet.

Im Falle von Atomen und Molekülen genügt es auf Grund des großen Masseunterschieds zwischen den Kernen und den Elektronen näherungsweise nur letztere quantenmechanisch zu behandeln. Diese so genannte Born-Oppenheimer-Näherung (Born und Oppenheimer, 1927) führt in der Regel zu ausreichender Genauigkeit. Weiterhin werden zur Berechnung von Energieniveaus und Bindungsenergien nur stationäre Wellenfunktionen benötigt. In diesem Fall ist die Wellenfunktion für N Elektronen eine Abbildung

$$(1.1) \quad \psi : (\mathbb{R}^3 \times \{\pm 1/2\})^N \rightarrow \mathbb{C}$$

in den Elektronenkoordinaten $r_i = (\mathbf{x}_i, \sigma_i)$ für $i = 1, \dots, N$. Dabei ist $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^3$ die Orts- und $\sigma_i \in \{\pm 1/2\}$ die Spinvariable (Eigendrehung) des i -ten Elektrons. Zum Beispiel ist die Wellenfunktion eines Wassermoleküls (H_2O) eine Abbildung in dreißig kontinuierlichen Variablen, da das Molekül $N = 10$ Elektronen enthält. Auf Grund der Ununterscheidbarkeit der Teilchen muss die Wellenfunktion zusätzlich antisymmetrisch bezüglich der Permutation der Variablen sein (Pauli-Prinzip).

Die Wellenfunktion muss der nichtrelativistischen stationären Schrödingergleichung genügen, das heißt Lösung zum Eigenwertproblem

$$(1.2) \quad H\psi = E\psi, \quad \psi \neq 0$$

sein. Der Eigenwert E ist dabei die Energie des Systems im Zustand ψ . Der Hamiltonoperator H ist in dimensionslosen atomaren Einheiten durch

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{\nu=1}^M \frac{Z_\nu}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{a}_\nu|_2} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|_2}$$

gegeben, wobei dort parametrisch die Positionen $\mathbf{a}_\nu \in \mathbb{R}^3$, $\nu = 1, \dots, M$, der Kerne und ihre Ladungen Z_ν eingehen. Hier bezeichnet Δ_i den Laplaceoperator bezüglich der i -ten Variablen \mathbf{x}_i . Relativistische Effekte, wie z.B. die Spin-Bahn-Kopplung, werden in diesem Modell nicht berücksichtigt. Dies führt dazu, dass die Wellenfunktion aus Gleichung (1.1) ohne Einschränkung als Abbildung nach \mathbb{R} anstatt nach \mathbb{C} gesehen werden kann.

Die mathematische Analyse der Schrödinger-Gleichung ist ein weit entwickeltes Feld. Die Grundlage der mathematischen Formulierung bildet die Theorie der unbeschränkten selbstadjungierten Operatoren (von Neumann, 1932). Kato konnte zeigen, dass die elektronische Schrödinger-Gleichung innerhalb dieses Rahmens formuliert werden kann (Kato, 1951b). Aussagen über das qualitative Spektrum konnten von Hunziker, van Winter und Zhislin erzielt werden, siehe dazu den Übersichtsartikel (Simon, 2000, und enthaltene Referenzen). Daneben konnte ebenfalls die Regularität der Eigenfunktionen, sowie deren qualitative Eigenschaften bestimmt werden, siehe dazu (Kato, 1957; Agmon, 1981; Fournais et al., 2005).

Von entscheidender Bedeutung für die vorliegende Arbeit ist eine Reihe von Ergebnissen von Yserentant zur gemischten Regularität der Eigenfunktionen in den letzten Jahren. Basierend auf der Formulierung der stationären Schrödinger-Gleichung über Bilinearformen auf Sobolevräumen (Yserentant, 2003) konnte gezeigt werden, dass mit wachsender Teilchenzahl auch die Regularität der Eigenfunktionen zunimmt (Yserentant, 2004). Im Spezialfall, bei dem die Spins aller N Elektronen übereinstimmen, existiert zum Beispiel die Ableitung

$$\frac{\partial^N \psi}{\partial x_{1,\alpha_1} \cdot \dots \cdot \partial x_{N,\alpha_N}}$$

im schwachen Sinne und ist quadratintegrabel. Dabei wählt α_i eine der drei Komponenten der i -ten Variable x_i aus. Die Ableitungsordnung bezüglich gemischter Ableitungen steigt linear in der Raumdimension an. Mehr noch konnte gezeigt werden, dass diese Ableitungen, wie auch die Wellenfunktion selbst, exponentiell abfallen (Yserentant, 2010a).

Die explizite Lösung der stationären Schrödinger-Gleichung für Atome und Moleküle ist im Wesentlichen nur für das Wasserstoffatom bekannt. Für alle anderen Fälle kann die Lösung nur näherungsweise mit Hilfe numerischer Methoden bestimmt werden. Dabei zeigt sich, dass die Hochdimensionalität der Wellenfunktion ψ die größte Schwierigkeit bereitet. Benutzt man zur Diskretisierung zum Beispiel gewöhnliche Finite Differenzen mit 100 Punkten in jeder Dimension, so erhält man für ein Molekül mit N Elektronen 10^{6N} Gitterpunkte - im Falle des Wassermoleküls sind dies schon 10^{60} Freiheitsgrade. Dieses exponentielle Ansteigen des Aufwands in der Anzahl der Dimensionen wird auch als Fluch der Dimensionen bezeichnet (Bellman, 1957).

Ungeachtet dieser Schwierigkeiten wurde jedoch schon seit der Entdeckung der Quantenmechanik versucht physikalische Eigenschaften aus der Schrödinger-Gleichung herzuleiten, siehe zum Beispiel (Heitler und London, 1927). Als Verfahren, die keine weitere Modellannahmen neben der Schrödinger-Gleichung verwenden, sind vor allem folgende Methoden zu nennen: Hartree-Fock (HF), Multiconfiguration Selfconsistent Field (MCSCF), Møller-Plesset Störungstheorie (MP), Configuration Interaction (CI), Coupled Cluster (CC) und Dichte-Funktional-Theorie (DFT). Ein Überblick über diese und weitere Ansätze findet sich zum Beispiel in (Helgaker et al., 2000). Vor allem mit der Dichte-Funktional-Theorie ist es möglich, Moleküle mit mehreren zehntausenden Atomen zu berechnen. Zur Diskretisierung werden dabei meistens speziell konstruierte Basisfunktionen, wie zum Beispiel kontrahierte Gauß-Orbitale (CGTO), verwendet.

Die oben genannten Methoden wurden auch mathematisch untersucht; die Hartree-Fock-Methode zum Beispiel in (Lieb und Simon, 1977), MCSCF in (Friesecke, 2003) und die Coupled Cluster Methode in (Schneider, 2009). Gerade in letzter Zeit existiert ein vermehrtes Interesse an der mathematischen Analyse der Schrödinger-Gleichung, siehe zum Beispiel (Friesecke und Goddard, 2009) und die Übersichtsartikel (Le Bris, 2003; Le Bris, 2005; Le Bris und Lions, 2005).

Die vorgenannten numerischen Methoden basieren dabei mehr auf vereinfachten Modellen der Schrödinger-Gleichung als auf einer numerischen Diskretisierung: die erreichbare Genauigkeit ist vom Modell bestimmt und kann nicht systematisch verbessert werden. Dies

tritt am offensichtlichsten bei der Dichte-Funktional-Theorie zu Tage, bei der jeweils die Austauschkorrelation für verschiedene Anwendungen neu modelliert werden muss.

In letzter Zeit wurde die Approximationsrate der Eigenfunktionen bezüglich systematischer Basen untersucht, sowohl für die Dichtematrix (Flad et al., 2006), die Hartree-Fock-Lösung (Flad et al., 2008) als auch die gesamte Wellenfunktion (Flad et al., 2007). Systematische Basen aufbauend auf Wavelets wurden dabei schon für den Jastrow-Faktor (Flad et al., 2002; Flad et al., 2004) als auch für Dichte-Funktional Berechnung BigDFT (Genovese et al., 2008) verwendet, siehe dazu auch den Übersichtsartikel (Arias, 1999). Eine Verknüpfung von Tensorproduktapproximation und Waveletbasen wurde in einer Reihe von Artikeln ausgearbeitet (Beylkin und Mohlenkamp, 2002; Beylkin und Mohlenkamp, 2004; Beylkin et al., 2008).

Neben diesen Methoden legen die Resultate von Yserentant (Yserentant, 2010a) über die Glattheit der Eigenfunktionen nahe, dünne Gitter zur Approximation der Wellenfunktionen zu benutzen. Diese Methode aus der Approximationstheorie hochdimensionaler Funktionen besitzt das Potential, den Fluch der Dimensionen zu brechen. Die Anfänge der Theorie gehen dabei auf die Arbeiten (Korobov, 1957; Korobov, 1959; Smolyak, 1963) über die Integration hochdimensionaler Funktionen zurück. Seit der Arbeit von (Zenger, 1990) wurden diese Methoden für die Diskretisierung partieller Differentialgleichungen verwendet. Für einen Überblick über die Grundlagen, die Geschichte und die Anwendung dünner Gitter siehe auch den Übersichtsartikel von (Bungartz und Griebel, 2004).

Die vorliegende Arbeit untersucht nun, inwieweit die Ergebnisse in (Yserentant, 2010a) eine effiziente Approximation der Wellenfunktionen mit Hilfe dünner Gitter ermöglichen und, darauf aufbauend, wie die so entstehenden Räume zur Diskretisierung der Schrödingergleichung verwendet werden können.

Erste Arbeiten in dieser Hinsicht verwendeten abgeschirmte dünne Gitter zur Diskretisierung des Wasserstoffatoms (Hilgenfeldt et al., 1995), um das Newtonpotential durch die Dünngitterinterpolante hinreichend genau darzustellen. In (Garcke, 1998; Garcke und Griebel, 2000) wurden Wasserstoff und Helium mit Hilfe der Kombinationstechnik diskretisiert und in (Garcke, 2008) diese Ergebnisse mit Hilfe der optimierten Kombinationstechnik verbessert. In (Yserentant, 2005) wurde eine Semidiskretisierung auf Teilbereichen im Fourierraum konstruiert. Die dünne Fouriertransformation wurde in (Griebel und Hamaekers, 2007) zur Diskretisierung verwendet, sowie in (Griebel und Hamaekers, 2006) dünne Gitter aufbauend auf Meyer-Wavelets. Um eine effizientere Approximation zu erzielen, wurde der Dünngitterraum in (Hamaekers, 2009; Griebel und Hamaekers, 2009) durch eine Hartree-Fock-Lösung erweitert. Als Ansatzraum wurde dabei eine approximative Mehrskalensbasis aufbauend auf der Gaußschen Glockenkurve verwendet, welche bereits in den klassischen Diskretisierungen der Quantenchemie sehr gute Approximationseigenschaften aufweisen. Unter der zusätzlichen Annahme, dass die Eigenfunktionen im Rahmen der Theorie der Finite Order Weights (Sloan et al., 2004; Wasilkowski und Woźniakowski, 2009) eine kleine effektive Dimension besitzen, kann das Anwachsen der Freiheitsgrade mit der Anzahl der Elektronen weiter begrenzt werden.

Ausgangspunkt der vorliegenden Arbeit sind die in (Yserentant, 2010a) hergeleiteten Aussagen über die Glattheit der Ortskomponenten

$$u_{\vec{\sigma}} : (R^3)^N \rightarrow \mathbb{R}, \quad \vec{x} \mapsto \psi(\vec{x}, \vec{\sigma})$$

gebundener Zustände ψ für alle Spinkonfigurationen $\vec{\sigma} \in \{\pm 1/2\}^N$. Im Folgenden werden diese Ergebnisse kurz zusammengefasst. Definiere dazu für eine Abklingrate $\gamma > 0$ die exponentielle Gewichtsfunktion

$$w_\gamma(\vec{x}) = \prod_{i=1}^N e^{\gamma|\mathbf{x}_i|_2},$$

wobei die Variable \vec{x} in N dreidimensionalen Koordinaten $x_1, \dots, x_N \in \mathbb{R}^3$ der Elektronen aufgeteilt wird. Weiterhin werden die Elektronen in zwei Gruppen

$$I_{\pm}(\vec{\sigma}) = \{i \mid \sigma_i = \pm 1/2\}$$

zerlegt, je nachdem ob sie Spin $+1/2$ oder $-1/2$ besitzen. Dann kann für die Fouriertransformierte $\widehat{w_{\gamma/2} u_{\vec{\sigma}}}$ des Produktes der Komponente $u_{\vec{\sigma}}$ und der Gewichtsfunktion $w_{\gamma/2}$ gezeigt werden, dass der Ausdruck

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + \left|\frac{\vec{\omega}}{\Omega}\right|^2\right) \left[\prod_{i \in I_+(\vec{\sigma})} \left(1 + \left|\frac{\omega_i}{\Omega}\right|^2\right) + \prod_{i \in I_-(\vec{\sigma})} \left(1 + \left|\frac{\omega_i}{\Omega}\right|^2\right) \right] |\widehat{w_{\gamma/2} u_{\vec{\sigma}}}(\vec{\omega})|^2 d\vec{\omega}$$

endlich ist, falls die Konstanten Ω und γ geeignet gewählt werden. Aus den Eigenschaften der Fouriertransformierten bezüglich Ableitungen folgt daraus, dass die erste schwache Ableitung des Produktes $w_{\gamma/2} u_{\vec{\sigma}}$ innerhalb einer Spingruppe I_{\pm} ein weiteres Mal bezüglich jeder dreidimensionalen Elektronenkoordinate abgeleitet werden kann. Die Ableitungsordnung wächst somit für bestimmte gemischte Ableitungen linear mit der Anzahl der Elektronen. Glattheitsaussagen dieser Art sind charakteristische Voraussetzungen, dass die mit Hilfe dünner Gitter erzielten Approximationsraten unabhängig oder nahezu unabhängig von der Anzahl der Dimensionen sind.

Im ersten Schritt werden diese Ergebnisse in dieser Arbeit dahingehend interpretiert, dass die Komponenten $u_{\vec{\sigma}}$ in bestimmten Sobolevräumen gemischter Ordnung liegen. Diese Räume werden klassischerweise dazu verwendet, die Approximationsrate bezüglich dünner Gitter zu bestimmen, siehe auch (Temlyakov, 1989; Bungartz und Griebel, 2004). Im Gegensatz zu den klassischen Sobolevräumen gemischter Ordnung wird zusätzlich eine Gewichtsfunktion eingeführt, die das räumliche Verhalten der Funktion und ihrer Ableitungen beschreibt.

Allgemein bestehen gewichtete Sobolevräume $H_{\text{mix}}^{m,k}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ gemischter Ordnung aus Funktionen u , deren schwache Ableitungen

$$\int_{\mathbb{R}^{dN}} \left| \frac{\partial^{|\vec{\alpha}|_1} u(\vec{x})}{\partial \vec{x}^{\vec{\alpha}}} \right|^2 w(\vec{x}) d\vec{x} < \infty$$

für alle Multiindizes der Form $\vec{\alpha} = \vec{\alpha}_{\text{mix}} + \vec{\alpha}_{\text{iso}} \in (\mathbb{N}^d)^N$ mit

$$\max_{i=1, \dots, N} |\alpha_{\text{mix}, i}|_1 \leq k, \quad \sum_{i=1}^N |\alpha_{\text{iso}, i}|_1 \leq m.$$

erfüllen, d.h. deren Ableitungen quadratintegrabel bezüglich der Gewichtsfunktion w sind. Allgemeiner als für die Schrödingergleichung wurde hier die Variable \vec{x} in N d -Tupel aufgeteilt und eine beliebige Gewichtsfunktion w verwendet. Damit kann jede m -te Ableitung von u zusätzlich in jedem d -Tupel noch k -fach abgeleitet werden.

Speziell für die Komponenten $u_{\vec{\sigma}}$ der gebundenen Zustände ψ der Schrödingergleichung kann nun über die speziellen Eigenschaften der Gewichtsfunktion w_{γ} gezeigt werden, dass die entsprechend skalierten Funktionen $u_{\vec{\sigma}}(\cdot/\Omega)$ in $H_{\text{mix}}^{1/2,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_{\gamma})$ enthalten sind. Dabei werden die Sobolevräume gebrochener Ordnung über die reelle Interpolationstheorie nach (Peetre, 1963b; Peetre, 1963a) eingeführt, siehe z.B. (Butzer und Scherer, 1968). Die Komponente $u_{\vec{\sigma}}$ und ihre Ableitungen sind daher sowohl im Ortsraum als auch im Fourierraum lokalisiert. Eine laufende Untersuchung (Kreusler, 2010) legt zudem die Vermutung nahe, dass die Komponenten sogar in $H_{\text{mix}}^{s,1}$ für alle $s < 3/4$ liegen.

Im zweiten Schritt wird die Komplexität der Approximation der einzelnen Komponenten $u_{\vec{\sigma}}$ bestimmt. Das heißt, es wird eine Approximation $u_{\vec{\sigma}, \varepsilon}$ als endliche Linearkombination von Basisfunktionen gesucht, so dass

$$(1.3) \quad \|u_{\vec{\sigma}} - u_{\vec{\sigma}, \varepsilon}\|_1 \lesssim \varepsilon$$

gilt, d.h. der Fehler in der H^1 -Norm bis auf eine Konstante kleiner oder gleich ε ist. Als Ansatzfunktionen werden dabei anisotrope Tensorprodukte von Wavelets gewählt. Diese Funktionen erfüllen die natürliche Anforderung an die Diskretisierung, sowohl im Ortsraum (Abklingverhalten) als auch im Fourierraum (gemischte Regularität), lokalisiert zu sein. Wavelets wurden in verschiedenen Gebieten, wie zum Beispiel Signalverarbeitung, Physik und reiner Mathematik, entwickelt. Eine umfassende Einführung findet sich dabei in (Daubechies, 1996; Cohen, 2003, und enthaltenen Referenzen).

Zur Konstruktion anisotroper Waveletbasen auf dem Raum $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$ setzen wir voraus, dass auf dem Raum $L^2(\mathbb{R}^d)$ eine biorthogonale Waveletbasis $\{\psi_\lambda\}_{\lambda \in \nabla}$, $\{\tilde{\psi}_\lambda\}_{\lambda \in \nabla}$ bezüglich einer Indexmenge ∇ existiert, so dass eine Normäquivalenz zwischen den geeignet gewichteten Entwicklungskoeffizienten und allen Sobolevräumen $H^s(\mathbb{R}^d)$ für $0 \leq s < \tau$ existiert. Die Schranke τ wird dabei von der Regularität und der Anzahl der verschwindenden Momente der Waveletbasis bestimmt. Die Existenz solcher Funktionen für beliebig großes τ ist wohlbekannt, z.B. erfüllen orthogonale Daubechies-Wavelets (Daubechies, 1988) und biorthogonale Spline-Wavelets (Cohen et al., 1992) die Voraussetzungen. Weiterhin ist es auch möglich, letztere Funktionen im Rahmen von Multi-Wavelets zu orthogonalisieren (Donovan et al., 1996). Mit Hilfe der d -dimensionalen Funktionen kann nun durch

$$\psi_{\vec{\lambda}} = \bigotimes_{i=1}^N \psi_{\lambda_i}, \quad \vec{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N) \in \nabla^N$$

(analog ebenfalls für $\tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}$) eine biorthogonale Waveletbasis $\{\psi_{\vec{\lambda}}\}_{\vec{\lambda} \in \nabla^N}$, $\{\tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}\}_{\vec{\lambda} \in \nabla^N}$ auf $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$ erzeugt werden. Der Waveletindex $\vec{\lambda}$ beinhaltet für jeden Faktor ψ_{λ_i} im Multiindex λ_i den jeweiligen Typ, die Stufe und die Verschiebung.

Die Konstruktion einer Approximanten $u_{\vec{\sigma}, \varepsilon}$ der Komponente $u_{\vec{\sigma}}$ erfolgt über die Herleitungen diskreter Normen für den gewichteten Sobolevraum $H_{\text{mix}}^{s,1}((\mathbb{R}^3)^N, w)$ gemischter Ordnung, in welchem $u_{\vec{\sigma}}$ liegt, siehe auch (DeVore et al., 1998; Griebel und Knapek, 2000). Etwas allgemeiner wird als erstes zentrales Resultat die Normäquivalenz für Räume $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$, d.h.

$$(1.4) \quad \|u\|_{\text{mix}, w, s, m}^2 \sim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{\text{iso}}^{2m}(\vec{\lambda}) \kappa_{\text{mix}}^{2s}(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2, \quad u = \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}},$$

für alle $m + s < \tau$ und genügend reguläre Gewichtsfunktionen w bewiesen. Die Gewichte der Entwicklungskoeffizienten $|u_{\vec{\lambda}}|^2$ werden zum einen durch die Gewichtsfunktion und zum anderen über die Ableitungsordnung bestimmt. Der erste Faktor, $w(\vec{x}_{\vec{\lambda}})$, bezeichnet den Wert der Gewichtsfunktion w am Mittelpunkt des Trägers von $\psi_{\vec{\lambda}}$ und ist damit nur von der örtlichen Lokalisierung der Ansatzfunktion $\psi_{\vec{\lambda}}$ abhängig. Die beiden anderen Faktoren, κ_{iso} und κ_{mix} , sind hingegen nur von den Stufen der Ansatzfunktion abhängig. Dabei charakterisiert κ_{iso} die isotrope und κ_{mix} die anisotrope Glattheit. Äquivalenzen dieser Art sind sowohl für Sobolevräume gemischter Ordnung (DeVore et al., 1998; Griebel und Knapek, 2000), Besov- und Triebel-Lizorkin-Räume (Triebel, 2006) als auch für gewichtete Räume isotroper Ordnung (Izumi und Sawano, 2009) bekannt. Zur Herleitung wird das Prinzip der Lokalisierung (Triebel, 2006) benutzt. Auf diese Weise können die Ergebnisse für ungewichtete Sobolevräume gemischter Ordnung (Griebel und Knapek, 2000) auf gewichtete Räume übertragen werden. Entscheidend ist dabei, dass sowohl die primalen als auch die dualen Wavelets beschränkten Träger besitzen.

Auf Grund der Tatsache, dass die zu approximierende Funktion $u_{\vec{\sigma}}$ ein Element des gewichteten Sobolevraums $H_{\text{mix}}^{s,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma)$ ist, können aus der Normäquivalenz (1.4) potentiell wichtige Ansatzfunktionen identifiziert werden. Speziell wählt man für die Konstruktion von $u_{\vec{\sigma}, \varepsilon}$ als Ansatzfunktionen diejenigen Wavelets aus, deren Indizes $\vec{\lambda} \in \nabla^N$

die Ungleichung

$$(1.5) \quad w_\gamma(\vec{x}_\lambda) \kappa_{\text{mix}}^{2s}(\vec{\lambda}) \leq \frac{1}{\varepsilon^2}$$

erfüllen. Die Parameter s und γ werden dabei durch den Raum $H_{\text{mix}}^{s,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma)$ bestimmt, in dem $u_{\vec{\sigma}}$ liegt. Approximiert man nun $u_{\vec{\sigma}}$ auf der so definierten Indexmenge, so erhält man eine Näherung $u_{\vec{\sigma},\varepsilon}$, die (1.3) erfüllt. Betrachtet man die mit einer Linearkombination $u_{\vec{\sigma},n}$ von n Basiselementen erreichbare Genauigkeit, so erhält man asymptotisch in n den Fehler

$$(1.6) \quad \|u_{\vec{\sigma}} - u_{\vec{\sigma},n}\|_1 \lesssim (\log n)^{s(N-1)} n^{-s/3}.$$

Speziell für $s = 1/2$ ergibt sich bis auf logarithmische Terme asymptotisch ein Genauigkeit von $n^{-1/6}$ unabhängig von der Anzahl der Elektronen N .

Die so erzielte Approximationsrate kann jedoch noch verbessert werden, wenn die spezielle Struktur der Komponente $u_{\vec{\sigma}}$ berücksichtigt wird. Auf Grund des Pauli-Prinzips müssen die einzelnen Komponenten partiell antisymmetrisch bezüglich $\vec{\sigma}$ sein, d.h. es muss

$$u_{\vec{\sigma}}(P\vec{x}, P\vec{\eta}) = \text{sign}(P) u_{\vec{\sigma}}(\vec{x}, \vec{\eta})$$

für alle Permutationen P mit $P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}$ gelten. Für eine Linearkombination u_n in n Basisfunktionen verbessert sich die Approximationsrate somit auf

$$\|u_{\vec{\sigma}} - u_{\vec{\sigma},n}\|_1 \lesssim e^{c\sqrt{\log n}} n^{-s/3}$$

asymptotisch in n , wobei die Konstante c nicht von n oder N abhängt. Für $s = 1/2$ erhält man eine Konvergenzrate von $n^{-1/6}$ in führender Ordnung. Als zentrales Resultat folgt somit, dass die einzelnen Komponenten gebundener Zustände mit einer Rate approximiert werden können, die unabhängig von der Anzahl der Elektronen ist. Der Fluch der Dimensionen ist damit gebrochen.

Im dritten Schritt werden die durch (1.5) definierten Ansatzräume in einem Galerkinverfahren zur Diskretisierung des Eigenwertproblems $H\psi = E\psi$ verwendet. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann die Berechnung auf $\lfloor N/2 \rfloor$ Eigenwertprobleme für bestimmte Komponenten $u_{\vec{\sigma}}$ beschränkt werden, siehe dazu (Yserentant, 2010a). Die erzielte Approximationsrate (1.6) überträgt sich nach dem Lemma von Cea auch auf die Näherungslösung. Das so entstehende diskrete Eigenwertproblem kann mit Hilfe iterativer Verfahren, siehe z.B. (Knyazev, 2001), gelöst werden. Durch die Mehrskalenstruktur der Ansatzfunktionen ist dabei ein einfacher Vorkonditionierer gegeben, dessen Kondition unabhängig von der Feinheit der Diskretisierung beschränkt werden kann. Die Berechnung der Elemente der Galerkinmatrix wird jedoch durch die partielle Antisymmetrie erschwert. Analog zu den Condon-Slater-Regeln für voll antisymmetrische Funktionen werden daher Regeln für partiell antisymmetrische Funktionen angegeben, die diese Berechnung vereinfachen. Jedoch ist die Diskretisierungsmatrix auf Grund des anisotropen Trägers der Basisfunktionen fast voll besetzt. Da zudem wegen der partiellen Antisymmetrie schnelle Algorithmen zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts, siehe (Balder und Zenger, 1996), nicht verwendet werden können, bestimmen die Kosten einer Anwendung der Diskretisierungsmatrix die Komplexität des numerischen Algorithmus.

Die vorgeschlagene Diskretisierung wird anhand des Heliumatoms getestet. Helium ist das erste nichttriviale elektronische System, für welches keine analytische Lösung vorliegt. Gemäß den Approximationsaussagen ist schon für dieses System die allgemeine Konvergenzrate zu erwarten. Lediglich die Antisymmetrie spielt dabei keine Rolle, so dass in diesem Fall die Algorithmen zur schnellen Matrix-Vektor-Multiplikation angewendet werden können. Um den Speicherverbrauch der Galerkinmatrix zu verringern wird dabei vorgeschlagen, das Newtonpotential durch eine Exponentialsumme anzunähern (Hackbusch, 2006). Dies führt dazu, dass die Multiplikationsoperatoren der Potentiale ebenfalls durch eine Summe von Tensorproduktoperatoren angenähert werden kann, also nur die einzelnen

Faktoren gespeichert werden müssen. Dabei wird untersucht, in wie weit diese Approximation Einfluss auf das Spektrum besitzt. Speziell werden die Parameter so bestimmt, dass die Auswirkungen unterhalb der chemischen Genauigkeit liegen. Als Ansatzfunktionen werden dabei vollständig anisotrope Basen benutzt, die auf den eindimensionalen Prewavelets aufgebaut sind (Chui und Wang, 1992; Niedermeier, 1999). Der Ansatzraum wird im Laufe der Rechnung adaptiv durch Verfeinerung bestimmt. Die Matrixelemente können durch die Approximation des Newtonpotentials durch eine Exponentialsummen effizient mittels einer zweidimensionalen numerischen Quadratur berechnet werden.

Bei der tatsächlichen Berechnung des kleinsten Eigenwertes von Helium sieht man, dass sich ab etwa 10^4 Freiheitsgraden eine asymptotische Rate von etwa $n^{-0.465}$ in der Anzahl der Basisfunktionen n einstellt. Dies entspricht in etwa der Approximationsrate, die sich durch eine $H_{\text{mix}}^{3/4,1}$ Regularität ergibt. Die genaueste Approximation mit etwa 22 Millionen Ansatzfunktionen liefert einen Fehler von ca. 7 mHa, und liegt damit weit über der chemischen Genauigkeit von etwa 1.6 mHa. Die Konvergenzrate erlaubt jedoch die Ergebnisse zu extrapolieren, womit der Fehler auf 1.7 mHa reduziert werden kann.

Die erzielten Ergebnisse ergeben ein zwiespältiges Gesamtbild. Auf der theoretischen Seite konnte gezeigt werden, dass die Eigenfunktionen tatsächlich mit einer von der Anzahl der Elektronen unabhängigen Rate approximiert werden können. Auf der praktischen Seite jedoch kann sogar der einfachste Fall des Heliumatoms nur mit immensen Aufwand zufriedenstellend gelöst werden.

Natürlich kann die Effizienz der vorgestellten numerischen Methode gesteigert werden. Ein Ansatzpunkt ist dabei die Verbesserung der Approximationseigenschaften der verwendeten Basis. Dies kann durch die Verwendung von Wavelets höherer Ordnung oder auch über die Erweiterung der systematischen Basis um aus der Quantenchemie wohlbekannte approximative Lösungen, wie z.B. die Hartree-Fock-Lösung, erreicht werden. Zudem kann der begrenzende Faktor bei der Approximation der Wellenfunktionen durch Tensorproduktfunktionen, d.h. der Elektron-Elektron-Cusp, wirkungsvoll mit Hilfe explizit korrelierter Ansatzfunktionen behandelt werden (Kutzelnigg und Klopper, 1991; Yserentant, 2010b).

Der andere wichtige Punkt betrifft die effiziente Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts. Insbesondere muss vermieden werden, die fast voll besetzte Diskretisierungsmatrix explizit aufzustellen. Der Schlüssel dazu ist einerseits die effiziente Behandlung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung und andererseits die Entwicklung unidirektionaler Algorithmen auf partiell antisymmetrischen dünnen Gittern, welche die Anwendung der Diskretisierungsmatrix auf die der Ein- und Zweiteilchenoperatoren reduziert. Dabei muss aber über die vielversprechende Approximation des Newtonpotentials als Exponentialsumme hinausgegangen werden. Eine Möglichkeit besteht darin, den glatten Teil des Potentials über die Kollokation zu behandeln, siehe (Hilgenfeldt et al., 1995), und nur für den singulären Teil die Diskretisierungsmatrix aufzustellen.

Aber auch die ausgeklügeltsten Ansatzfunktionen werden nicht über das grundsätzliche Problem linearer Ansätze in der Quantenchemie hinweghelfen, die eben nicht größenkonsistent (*size consistent*) sind. Aus diesem Grund können auch verbesserte Algorithmen nur für kleine Systeme mit wenigen Elektronen verwendet werden. In diesem Spezialfeld könnten sich die vorgestellten Methoden durch ihr systematisches Konvergenzverhalten etablieren. Den vielversprechendsten Ansatz liefert dabei die Arbeit von (Hamaekers, 2009), in welcher die Systematik eines dünnen Gitters mit der Effizienz klassischer quantenchemischer Verfahren gekoppelt wird.

Auf der theoretischen Seite ist die Untersuchung der elektronischen Schrödingergleichung im Hinblick auf die Theorie der nichtlinearen besten n -Term Approximation, siehe z.B. (DeVore, 1998), zu nennen. Dazu müssen zum einen Approximationsräume analog zu (Nitsche, 2004) bestimmt werden und zum anderen entsprechende Regularitätsaussagen

der stationären Zustände hergeleitet werden. Daraufhin können Algorithmen konstruiert werden, die diese Regularität ausnutzen. Ein möglicher Weg führt dabei auf die in (Cohen et al., 2001) entwickelten und in (Dahmen et al., 2008; Rohwedder et al., 2010) auf Eigenwertprobleme spezialisierten Algorithmen, die für eine große Klasse von Problemen quasi-optimale Konvergenzraten liefern. Diese Algorithmen beruhen auf iterativen Verfahren auf dem unendlichdimensionalen Raum der Entwicklungskoeffizienten. Ein Schlüssel zur Realisierung ist die effiziente näherungsweise Anwendung der unendlich großen Diskretisierungsmatrix. Diese lassen sich jedoch für eine große Klasse von Operatoren, auch in hohen Dimensionen (Schwab und Stevenson, 2008), für jede Genauigkeit effizient durch dünnbesetzte Matrizen mit nur endlich vielen Einträgen in jeder Zeile und Spalte nähern (*s*-compressible/computable*). Auf diese Weise kann die Matrix-Vektor-Multiplikation effizient für jede gewünschte Genauigkeit berechnet werden. Die Frage, ob die Diskretisierungsmatrix des Hamiltonoperators ebenfalls kompressibel ist, ist Gegenstand aktueller Forschung (Flad und Schneider, 2010).

Die vorliegende Arbeit ist in drei große Teile aufgeteilt: Im ersten wird die Galerkindiskretisierung hochdimensionaler Problem mit Hilfe anisotroper Waveletbasen im allgemeinen Fall diskutiert. Erst anschließend werden diese Ergebnis im zweiten Teil auf den Fall der Schrödingergleichung spezialisiert. Im letzten Teil werden numerische Experimente für das Heliumatom gezeigt.

Der erste Teil beginnt dabei mit einem einführenden Kapitel über die Approximation multivariater Funktionen. Anhand eines einfachen Modellsystems wird aufgezeigt wie dünne Gitter den sogenannten Fluch der Dimensionen herkömmlicher Diskretisierungen brechen können. In Kapitel 3 werden die gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung eingeführt, wobei die Menge der zulässigen Gewichtsfunktionen beschränkt wird. Für diese Räume wird anhand des Lokalisierungsprinzips eine äquivalente Norm eingeführt, die sich als Summe ungewichteter Normen auf Würfeln darstellen lässt. Aufbauend auf dieser Norm können dann in Kapitel 4 diskrete Normen auf den Entwicklungskoeffizienten einer Waveletbasis angegeben werden. Für den Spezialfall eines exponentiellen Gewichts werden damit in Kapitel 5 Approximanten konstruiert und Abschätzungen für deren Konvergenzrate angegeben. Kapitel 6 zeigt, wie die so bestimmten endlichen Teilräume als Ansatzräume eines Galerkinverfahrens benutzt werden können. Dabei liegt der Schwerpunkt auf iterativen Lösern und einer entsprechenden Vorkonditionierung. Das letzte Kapitel des ersten Teils beschäftigt sich mit der schnellen Matrix-Vektor-Multiplikation.

Im zweiten Teil wird in Kapitel 8 kurz auf die grundlegende stationäre Schrödingergleichung eingegangen und Literatur zu diesem Thema zitiert. Im darauf folgenden Kapitel 9 werden die Eigenschaften des Spektrums und der Eigenfunktionen diskutiert, speziell die Resultate über die Existenz gemischter Ableitungen. In Kapitel 10 werden antisymmetrische dünne Gitter konstruiert und deren Approximationsraten abgeschätzt. Das letzte Kapitel des zweiten Teils beschäftigt sich mit den Matrixelementen der Diskretisierungsmatrix.

Im letzten Teil werden numerische Ergebnisse zum Heliumatom vorgestellt. Dabei wird in Kapitel 12 das Newtonpotential approximiert um die numerischen Berechnungen zu vereinfachen, wobei der Fehler im Spektrum kontrolliert wird. Die eigentlichen numerischen Ergebnisse werden in Kapitel 13 vorgestellt.

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei Herrn Prof. Dr. Harry Yserentant für die Betreuung und die Unterstützung bedanken. Prof. Dr. Helmut Harbrecht danke ich für sein Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Zweitgutachtens. Nicht zuletzt danke ich der gesamten Arbeitsgruppe von Herrn Yserentant, speziell Dr. Heinz-Jürgen Flad, Dr. Jochen Garcke, Christian Kamm, Christian Kreuzler und André Uschmajew für die Diskussionen, die Unterstützung und die nette Zeit.

Teil 1

Galerkinverfahren auf dünnen Gittern

Approximation hochdimensionaler Funktionen

Bei der näherungsweise Lösung von Eigen- und Randwertproblemen mit Hilfe des Galerkinverfahrens, siehe zum Beispiel (Braess, 2003) oder (Brenner und Scott, 2008), wird in einem gewählten endlichdimensionalen Unterraum des ursprünglichen Raumes eine approximative Lösung bestimmt. Deren Genauigkeit ist dabei nach Céa's Lemma im Wesentlichen durch die Bestapproximation der Lösung in diesem Unterraum gegeben. Für spezielle Kombinationen von Funktionenklassen und Ansatzfunktionen, wie zum Beispiel Sobolevräume und lineare Finite Elemente, können so mit Hilfe von Ergebnissen der Approximationstheorie Konvergenzraten abgeschätzt werden.

Ein zentraler Punkt bei der approximativen Lösung von Problemen in hohen Dimensionen ist demnach die Approximierbarkeit multivariater Funktionen. Im vorliegenden Kapitel wird daher anhand eines einfachen Modellproblems diskutiert, wie sich die Approximationsrate mit steigender Zahl von Dimensionen verhält. Besitzt die zu approximierende Funktion lediglich gewöhnliche Sobolevregularität, so wächst der Aufwand zur Diskretisierung exponentiell in der Anzahl der Dimensionen, was auch als Fluch der Dimensionen bekannt ist (Bellman, 1957). Im Gegensatz dazu kann die Existenz gemischter Ableitungen den Fluch bis zu einem gewissen Grad brechen.

Grundlage dafür sind dünne Gitter, deren Anfänge sich in der russischen Literatur finden. Analog zum Vorgehen in Abschnitt 3 hat Babenko (Babenko, 1960) zur Approximation multivariater Funktionen hyperbolische Kreuze im diskreten Fourierraum eingeführt. Weiterhin wurde die Idee von dünnen Gittern auch bei der Integration multivariater Funktionen (Smolyak, 1963) ausgenutzt. Die systematische Untersuchung zur Verwendung von dünnen Gittern als Ansatzraum einer Galerkin-Diskretisierung wurde mit (Zenger, 1990) eingeleitet. Eine Zusammenfassung der Geschichte sowie der Verwendung von dünnen Gittern und viele Literaturangaben finden sich im Übersichtsartikel (Bungartz und Griebel, 2004).

Der Rest des Kapitels ist wie folgt aufgebaut. In Abschnitt 1 wird das Approximationsproblem vorgestellt. Um die Problematik der hohen Dimensionen klarer herauszuarbeiten, werden bei dem Modellproblem einige Vereinfachungen getroffen. Zum einen wird das Gebiet auf einen endlichen Würfel beschränkt, das heißt das Abklingverhalten muss nicht berücksichtigt werden. Zum anderen werden die Funktionen durch wohl bekannte trigonometrische Funktionen approximiert. In Abschnitt 2 wird die Approximationsrate berechnet, wenn die zu approximierende Funktion in klassischen Sobolevräumen liegt. Die Kernaussage dieses Kapitels wird in Abschnitt 3 herausgearbeitet: Besitzt die zu approximierende Funktionen gewisse gemischte Ableitungen höherer Ordnung, bleibt die Approximationsrate im Wesentlichen unabhängig von der zugrunde liegenden Dimension.

Obwohl in diesem Kapitel nur ein Modellproblem behandelt wird, kann es dennoch als Leitfaden für die folgenden Kapitel dienen. Die grundlegende Struktur kann auch bei der Herleitung von Approximationsraten bezüglich anisotroper Wavelets verwendet werden, siehe dazu auch Kapitel 4 und 5.

1. Problemstellung

Ziel unserer Betrachtungen ist es, eine 2π -periodische Funktion $u : (0, 2\pi)^N \rightarrow \mathbb{R}$ in N Variablen durch ein trigonometrisches Polynom zu approximieren. Bezeichnet man die trigonometrischen Monome dabei mit

$$v_{\vec{k}}(\vec{x}) = (2\pi)^{-N/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}, \quad \vec{k} \in \mathbb{Z}^N,$$

so lässt sich eine Approximation \bar{u} durch

$$\bar{u} = \sum_{\vec{k} \in \mathcal{I}} \bar{u}_{\vec{k}} v_{\vec{k}}$$

mit einer endlichen Teilmenge $\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^N$ darstellen. Die Genauigkeit wird dabei in der L^2 -Norm gemessen, das heißt der Ausdruck

$$\|u - \bar{u}\|_0 := \left(\int_{(0, 2\pi)^N} |u(x) - \bar{u}(x)|^2 dx \right)^{1/2}$$

soll minimiert werden. Hier und im Folgenden werden N -dimensionale Vektoren mit einem Pfeil gekennzeichnet.

Insbesondere soll das asymptotische Verhalten der Genauigkeit $\|u - \bar{u}\|_0$ der Approximation bezüglich der Anzahl der Summanden, das heißt der Mächtigkeit $\#\mathcal{I}$ von \mathcal{I} , untersucht werden. Die Konvergenzrate wird dabei bezüglich einer spezieller Funktionenklasse differenzierbarer Funktionen abgeschätzt. Untersucht wird somit das asymptotische Verhalten der Funktion

$$\sigma_n = \inf_{\substack{\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^N \\ \#\mathcal{I} = n}} \sup_{\substack{u \in H \\ \|u\|_H = 1}} \inf_{\bar{u} = \sum_{\vec{k} \in \mathcal{I}} \bar{u}_{\vec{k}} v_{\vec{k}}} \|u - \bar{u}\|_0$$

in der Anzahl n der Summanden. Hierbei bezeichnet H eine Menge von Funktionen mit gewissen Glattheitseigenschaften, die durch die entsprechende Norm $\|\cdot\|_H$ gegeben ist. σ_n beschreibt also die bestmögliche Genauigkeit, die durch trigonometrische Polynome mit n fest gewählten Monomen über die Einheitskugel in H erreicht werden kann.

In diesem Kapitel wird der Fall untersucht, bei dem H durch Sobolevräume gewöhnlicher oder gemischte Regularität gegeben ist. Generell gilt, dass desto bessere Konvergenzraten zu erwarten sind, je glatter die Funktion ist. Grundlegend ist dabei die Theorie der Fourierreihen, wie man sie zum Beispiel in Lehrbüchern von (Königsberger, 2001) oder (Wilcox und Myers, 1994) findet.

2. Isotrope Sobolevregularität

In diesem Abschnitt wird die asymptotische Konvergenzrate abgeschätzt, wenn die zu approximierende Funktion gewöhnliche Sobolevregularität besitzt, siehe z.B. (Adams, 1975; Kufner et al., 1977). Wir nehmen dazu an, dass die Funktion ein Element des Sobolevraums $H^m((0, 2\pi)^N)$ der Ordnung m ist sowie die Funktion und alle Ableitungen bis zur Ordnung m 2π -periodisch sind. Die Norm $\|\cdot\|_m$ auf $H^m((0, 2\pi)^N)$ wird dabei durch das Skalarprodukt

$$\langle u, v \rangle_m = \sum_{\substack{\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\alpha}|_1 \leq m}} \int_{(0, 2\pi)^N} \partial^{\vec{\alpha}} u(\vec{x}) \partial^{\vec{\alpha}} v(\vec{x}) d\vec{x}$$

induziert. Die auftretenden Ableitungen mit den Multiindizes $\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N$, d.h.

$$\partial^{\vec{\alpha}} u = \frac{\partial^{|\vec{\alpha}|_1} u}{\partial x_1^{\alpha_1} \cdot \dots \cdot \partial x_N^{\alpha_N}},$$

sind dabei im schwachen Sinne zu verstehen, wobei $|\cdot|_p$ die ℓ_p -Norm auf \mathbb{N}^N bezeichnet.

Bezeichnet nun $H_{2\pi}^m((0, 2\pi)^N)$ die Vervollständigung der unendlich oft differenzierbaren und 2π -periodischen Funktionen bezüglich der Norm $\|\cdot\|_m$, so nehmen wir an, dass die zu approximierende Funktion u ein Element von $H_{2\pi}^m((0, 2\pi)^N)$ mit $m \geq 1$ ist. Zur Konstruktion der Approximante \bar{u} werden wir die Eigenschaften der trigonometrischen Monome ausnutzen. Die Menge $(v_{\vec{k}})_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N}$ bildet ein vollständiges Orthonormalsystem von $L^2((0, 2\pi)^N)$. Damit lässt sich u eindeutig als

$$(2.1) \quad u = \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}, \quad u_{\vec{k}} = \langle (v_{\vec{k}})^*, u \rangle_0$$

darstellen, wobei der Limes im L^2 -Sinne zu verstehen ist. Der Stern beim ersten Argument des Skalarprodukts bezeichnet die Komplexkonjugation. Die Koeffizienten $(u_{\vec{k}})_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N}$ werden wie üblich Fourierkoeffizienten von u genannt. Durch die Orthonormalität der trigonometrischen Monome ist die Bestapproximation \bar{u} auf einer gegebenen Indexmenge $\mathcal{I} \subset \mathbb{Z}^N$ durch

$$\bar{u} = \sum_{\vec{k} \in \mathcal{I}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}$$

gegeben. Im Weiteren werden geeignete Indexmengen \mathcal{I} bestimmt und die Genauigkeit abgeschätzt.

Neben der L^2 -Orthonormalität stehen die trigonometrischen Monome bezüglich aller Skalarprodukte auf $H^m((0, 2\pi)^N)$ mit $m \in \mathbb{N}$ paarweise senkrecht, das heißt es gilt

$$\langle (v_{\vec{k}})^*, v_{\vec{k}'} \rangle_m = \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \cdot \sum_{\substack{\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\alpha}|_1 \leq m}} \vec{k}^{2\vec{\alpha}}, \quad \vec{k}, \vec{k}' \in \mathbb{Z}^N.$$

Hierbei wird die Notation

$$\vec{k}^{2\vec{\alpha}} = k_1^{2\alpha_1} \cdot \dots \cdot k_N^{2\alpha_N}$$

für Multiindizes $\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N$ verwendet. Damit gilt

$$(2.2) \quad \|u\|_m^2 = \sum_{\substack{\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\alpha}|_1 \leq m}} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} \vec{k}^{2\vec{\alpha}} |u_{\vec{k}}|^2,$$

als Verallgemeinerung der Parsevalschen Gleichung. Man kann leicht zeigen, dass die Normäquivalenz

$$\|u\|_m^2 \sim \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} (1 + |\vec{k}|_2^2)^m |u_{\vec{k}}|^2.$$

gilt. Hier und im Folgenden wird $a \sim b$ geschrieben, wenn sich a jeweils durch ein Vielfaches von b nach oben ($a \lesssim b$) und unten ($a \gtrsim b$) abschätzen lässt. Die auftretende Konstante wird dabei nicht näher spezifiziert.

Nach Voraussetzung ist u ein Element von $H_{2\pi}^m((0, 2\pi)^N)$. Insbesondere muss daher

$$\sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} |\vec{k}|_2^{2m} |u_{\vec{k}}|^2 \lesssim \|u\|_m^2 < \infty$$

gelten. Das bedeutet, dass die Koeffizienten $u_{\vec{k}}$ im ℓ^2 -Sinne wie $|\vec{k}|_2^{-m}$ abfallen. Betrachtet man die Isoflächen des Gewichts $|\vec{k}|_2^m$, so erhält man konzentrische Kreise im Koeffizientenraum, siehe dazu auch Abbildung 1(a) für eine schematische Darstellung im Falle $N = 2$ und $m = 1$.

Wenn nun eine Funktion durch eine endliche Linearkombination der Basisfunktionen $(v_{\vec{k}})_{\vec{k}}$ dargestellt werden soll, so kann diese a priori Information verwendet werden, um endlich viele Indizes \vec{k} auszuwählen. Dabei wird man nur solche Indizes \vec{k} berücksichtigen, für die der zugehörige Koeffizient $u_{\vec{k}}$ potentiell groß ist. Ein Maß dafür ist die Größe des

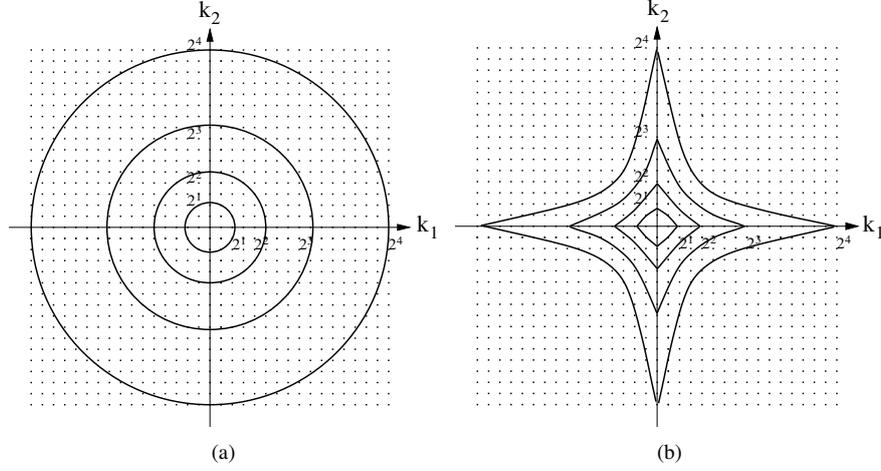


ABBILDUNG 1. Schematische Darstellung der Isolinien 2^1 , 2^2 , 2^3 und 2^4 für $|k_1|^2 + |k_2|^2$ (a) und $(1 + |k_1|^2) \cdot (1 + |k_2|^2)$ (b).

Gewichts: je kleiner das Gewicht, desto größer kann der dazugehörige Koeffizient sein und umgekehrt. Aus diesen Überlegungen setzen wir die Indexmenge

$$(2.3) \quad \mathcal{I}_L = \{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N \mid |\vec{k}|_2^2 \leq 2^{2L}\}, \quad L \in \mathbb{N},$$

das heißt alle Punkte \vec{k} , die innerhalb des Kreises um den Ursprung mit Radius 2^L liegen. Die Approximante sei nun durch

$$u_L := \sum_{\vec{k} \in \mathcal{I}_L} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}.$$

definiert. Damit unterscheidet sich die Approximante u_L und die Funktion u in der Entwicklung nach trigonometrischen Monomen nur in den Indizes $\vec{k} \notin \mathcal{I}_L$. Mit Hilfe der Normgleichheit aus Gleichung (2.2) gilt daher die Fehlerdarstellung

$$(2.4) \quad \|u - u_L\|_0^2 = \left\| \sum_{\vec{k} \notin \mathcal{I}_L} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \right\|_0^2 = \sum_{\vec{k} \notin \mathcal{I}_L} |u_{\vec{k}}|^2.$$

Benutzt man nun die Definition der Koeffizientenmenge aus Gleichung (2.3), so kann der Approximationsfehler zu

$$(2.5) \quad \|u - u_L\|_0^2 \leq \sum_{\vec{k} \notin \mathcal{I}_L} \underbrace{\left(\frac{|\vec{k}|_2^2}{2^{2L}} \right)^m}_{\geq 1} |u_{\vec{k}}|^2 \leq 2^{-2Lm} \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} |\vec{k}|_2^{2m} |u_{\vec{k}}|^2 \lesssim 2^{-2Lm} \|u\|_m^2.$$

abgeschätzt werden. Damit wird die Funktion u durch u_L in der L^2 -Norm bis auf 2^{-Lm} genau approximiert.

Diese Genauigkeit muss im Verhältnis zum Aufwand, das heißt zur Anzahl der benötigten Freiheitsgrade, gesehen werden. Dazu muss nun die Mächtigkeit der Indexmenge \mathcal{I}_L abgeschätzt werden. Nach Konstruktion ist diese durch die Anzahl ganzzahliger Indizes $\vec{k} \in \mathbb{Z}^N$ gegeben, die innerhalb einer N -dimensionalen Kugel um den Ursprung mit Radius 2^L liegen: $|\vec{k}|_2^2 \leq 2^{2L}$. Diese Anzahl kann asymptotisch durch das Volumen der N -dimensionalen Kugel abgeschätzt werden und man erhält dadurch die Mächtigkeit

$$\#\mathcal{I}_L \sim (2^L)^N = 2^{LN},$$

wobei die Konstante nicht von L abhängt.

Um eine Genauigkeit $\varepsilon > 0$ der Approximation zu erhalten, muss die Diskretisierungsstufe L entsprechend

$$\|u - u_L\|_0 \lesssim 2^{-Lm} \|u\|_m \leq \varepsilon \quad \Rightarrow \quad L \geq -\log_2(\varepsilon/\|u\|_m)/m + c$$

gewählt werden, wobei sich die Konstante c aus dem Faktor der Fehlerabschätzung ergibt. Dem entspricht somit ein trigonometrisches Monom u_L mit

$$N_\varepsilon \sim 2^{LN} \sim 2^{-\log_2(\varepsilon/\|u\|_m) N/m} = (\varepsilon/\|u\|_m)^{-N/m} \sim \varepsilon^{-N/m}$$

Termen asymptotisch in ε . Stellt man das Ergebnis um, so kann mit einer Linearkombination u_n von $n = 2^L$ Termen asymptotisch ein Fehler von

$$\|u - u_n\|_0 \lesssim n^{-m/N}$$

erreicht werden. Das bedeutet, dass sich bei fester Regularität m und immer größeren Dimensionen N die Konvergenzrate um den Faktor N verschlechtert. Dies wird auch als Fluch der Dimensionen bezeichnet (Bellman, 1957).

Steigt die Regularität m mit der Anzahl der Dimensionen N mindestens linear an, ist die Konvergenzrate unabhängig von der Anzahl der Dimensionen. Für gewöhnlich kann ein solches Verhalten jedoch nicht erwartet werden.

3. Gemischte Regularität

In diesem Abschnitt wird gezeigt, dass eine effiziente Approximation einer multivariaten Funktion konstruiert werden kann, wenn *bestimmte* höhere Ableitungen existieren. Insbesondere werden wir annehmen, dass für die zu approximierende Funktion u die schwache Ableitung der Form

$$(2.6) \quad \frac{\partial^{N_m} u}{\partial x_1^m \cdot \dots \cdot \partial x_N^m}$$

für ein $m \geq 1$ existiert. Da jedoch nicht vorausgesetzt wird, dass alle Ableitungen der Ordnung mN existieren, ist die Forderung schwächer als die nach gewöhnlicher Sobolevregularität der Ordnung mN .

Als Beispiel einer Funktion, die höhere Ableitungen der obigen Form besitzt, aber nicht alle Ableitung der entsprechenden Ordnung, sei

$$u = \bigotimes_{i=1}^N u_i$$

gegeben. Die Funktion ist ein Tensorprodukt¹ N univariater Funktionen u_i , die jeweils m -fach schwach differenzierbaren seien. Damit folgt, dass u als Funktion in N Variablen zwar m -fach, jedoch im Allgemeinen nicht mN -fach schwach differenzierbar ist. Darüber hinaus existieren aber höhere Ableitungen bis zur Ordnung mN , wie zum Beispiel die in Gleichung (2.6) angegebene. Für Funktionen dieser Art wächst die Differentiationsordnung für *bestimmte* Ableitung linear in der Anzahl der Dimensionen.

Als neue Regularitätsklasse führen wir den Sobolevraum $H_{\text{mix}}^m((0, 2\pi)^N)$ gemischter Ordnung ein, siehe auch (Schmeisser und Triebel, 1987; Bungartz und Griebel, 2004). Durch

$$\langle u, v \rangle_{\text{mix}, m} = \sum_{\substack{\vec{\alpha} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\alpha}|_\infty \leq m}} \int_{(0, 2\pi)^N} \partial^{\vec{\alpha}} u(\vec{x}) \partial^{\vec{\alpha}} v(\vec{x}) \, d\vec{x}$$

ist auf $H_{\text{mix}}^m((0, 2\pi)^N)$ ein Skalarprodukt gegeben, das die Norm $\|\cdot\|_{\text{mix}, m}$ induziert.

Im Vergleich zu gewöhnlichen Sobolevräumen H^m hat sich hierbei die Indexmenge bezüglich der Ableitungen geändert. Nun wird nicht mehr über alle Multiindizes $\vec{\alpha}$ mit $|\vec{\alpha}|_1 \leq m$

¹Für eine Einführung in Tensorprodukte und Tensorprodukträume siehe Anhang B.

summiert, sondern über solche mit $|\vec{\alpha}|_\infty \leq m$. Setzt man speziell $\alpha_i = m$ für alle $i = 1, \dots, N$ so erhält man genau die Ableitung mN -ter Ordnung aus Gleichung (2.6).

Unter Ausnutzung der erhöhten Regularität, es gilt offensichtlich $H_{\text{mix}}^m \subset H^m$, können nun effizientere Approximanten konstruiert werden. Dazu wird nicht mehr die Indexmenge \mathcal{I}_L aus Gleichung 2.3 verwendet, sondern ein sogenanntes hyperbolisches Kreuz. Dieser Ansatz wurde schon in (Babenko, 1960) verwendet.

Wir nehmen nun an, dass u ein Element von $H_{\text{mix}, 2\pi}^m((0, 2\pi)^N)$ ist, d.h. der Vervollständigung unendlich oft stetig differenzierbarer und 2π -periodischer Funktionen bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix}, m}$. Analog zu Abschnitt 2 kann man ebenfalls die Norm der gemischten Sobolevräume über die Fourierkoeffizienten ausdrücken. Man erhält eine Äquivalenz

$$\|u\|_{\text{mix}, m}^2 \sim \sum_{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N} \prod_{i=1}^N (1 + |k_i|^2)^m |u_{\vec{k}}|^2.$$

Betrachtet man die Isoflächen dieses Gewichts, so erhält man ein hyperbolisches Kreuz, siehe dazu auch Abbildung 1(b) für eine schematische Darstellung im Falle $N = 2$ und $m = 1$. Aus diesem Grunde werden die gewöhnlichen Sobolevräume auch isotrop genannt und die gemischten anisotrop.

Man definiert nun anhand dieses Abklingverhaltens analog zum letzten Abschnitt eine neue Indexmenge

$$\mathcal{J}_L = \{\vec{k} \in \mathbb{Z}^N \mid \prod_{i=1}^N (1 + |k_i|^2) \leq 2^{2L}\}.$$

Mit der selben Argumentation wie in den Gleichungen (2.4) und (2.5) folgt

$$\|u - \sum_{\vec{k} \in \mathcal{J}_L} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}\|_0 \lesssim 2^{-Lm} \|u\|_{\text{mix}, m}.$$

Um die Konvergenzrate in diesem Fall zu bestimmen, muss die Anzahl der Koeffizienten $\vec{k} \in \mathcal{J}_L$ abgeschätzt werden. Dazu benutzt man eine Überdeckung der Indexmenge \mathcal{J}_L durch dyadische Bereiche

$$\mathcal{K}_{\vec{j}} := \prod_{i=1}^N \mathcal{K}_{j_i}, \quad \mathcal{K}_j = \{k \in \mathbb{Z} \mid 2^{2j} \leq 1 + |k|^2 < 2^{2(j+1)}\}$$

für Indizes $\vec{j} \in \mathbb{N}^N$. Man kann leicht zeigen, dass

$$\mathcal{J}_L \subset \bigcup_{|\vec{j}|_1 \leq L} \mathcal{K}_{\vec{j}}$$

gilt. Mit Hilfe der Abschätzung $\#\mathcal{K}_{\vec{j}} \sim 2^{|\vec{j}|_1}$ und kombinatorischen Überlegungen folgt so

$$\mathcal{J}_L \lesssim L^{N-1} 2^L,$$

wobei die auftretende Konstante unabhängig von L ist. Für eine detailliertere Darstellung siehe zum Beispiel (Bungartz und Griebel, 2004). Somit ist die Mächtigkeit von \mathcal{J}_L verglichen mit \mathcal{I}_L entschieden kleiner, wobei dennoch die gleiche Genauigkeit in der Approximation erzielt wird.

Mit Hilfe dieser Abschätzung kann nun die Konvergenzrate bestimmt werden. Für die Approximation der Funktion $u \in H_{\text{mix}, 2\pi}^m((0, 2\pi)^N)$ bis auf einem Fehler von ε bezüglich der L^2 -Norm benötigt man den Diskretisierungsparameter L mit

$$\|u - u_L\|_0 \lesssim 2^{-Lm} \|u\|_{\text{mix}, m} \leq \varepsilon \quad \Rightarrow \quad L \geq -\log_2(\varepsilon / \|u\|_{\text{mix}, m}) / m + c$$

asymptotisch in ε , wobei sich die Konstante c aus dem Faktor der Fehlerabschätzung ergibt. Dies entspricht einer Anzahl von

$$N_\varepsilon \sim |\log(\varepsilon/\|u\|_{\text{mix},m})|^{N-1} (\varepsilon/\|u\|_{\text{mix},m})^{-1/m} \sim |\log \varepsilon|^{N-1} \varepsilon^{-1/m}$$

Termen in der endlichen Fourierreihe. Stellt man wiederum nach der Anzahl der Summanden $n \sim L^{N-1} \cdot 2^L$ um, so erhält man als Abschätzung

$$\|u - u_n\|_0 \lesssim (\log n)^{m(N-1)} \cdot n^{-m},$$

wobei hier $L \lesssim \log n$ verwendet wurde.

Bis auf logarithmische Terme ist die Approximationsrate einer Funktion in N Variablen mit gemischten Ableitungen der Ordnung m gleich der eines eindimensionalen Problems mit isotroper Regularität m . Der Fluch der Dimensionen ist somit im Hinblick auf die Konvergenzrate bis auf logarithmische Terme gebrochen.

Im vorliegenden Fall des einfachen Modellproblems erlaubt die Existenz höherer Ableitungen gemischter Ordnung somit eine effiziente Approximation. Eine analoge Situation ergibt sich jedoch allgemeiner auch bei der Approximation von Funktionen in gewichteten Sobolevräumen wie sie in den folgenden Kapiteln behandelt wird. Obwohl statt trigonometrischer Polynome anisotrope Wavelets zur Approximation verwendet werden, ist das Vorgehen zur Herleitung von Konvergenzraten diesem Kapitel sehr ähnlich. Damit kann dieses Kapitel als Leitfaden der vorliegenden Arbeit dienen.

Zusammenfassend gesehen, waren die Normäquivalenzen zwischen den kontinuierlichen Normen und den gewichteten Koeffizienten grundlegend: zum einen zu der Norm, bezüglich der approximiert werden soll, im vorliegenden Fall die L^2 -Norm, und zum anderen zu der stärkeren Norm, hier entweder H^m oder H_{mix}^m . Auf Basis der diskreten Normen wählt man nun sukzessive die Koeffizienten mit dem kleinsten Gewicht aus bis man die gewünschte Genauigkeit erhält. Zur Berechnung der Konvergenzrate musste anschließend noch die Mächtigkeit der dadurch bestimmten Indexmenge berechnet werden.

Eine ähnliche Situation wird sich ebenfalls bei der Approximation von Funktionen in gewichteten Sobolevräumen ergeben. Waren die Normäquivalenzen durch die Parsevalsche Gleichung im Falle trigonometrischer Polynome schon gegeben, müssen diese für die Waveletdiskretisierung und die entsprechenden Räume erst hergeleitet werden. Dabei kommt als weitere Schwierigkeit ein unbeschränktes Gebiet hinzu und darüber hinaus speziell bei der Schrödingergleichung noch die Antisymmetrie. Das weitere Vorgehen, d.h. die Auswahl geeigneter Ansatzfunktionen und die Bestimmung der Anzahl der Freiheitsgrade, wird dann anschließend jedoch wieder ähnlich verlaufen.

Gewichtete Sobolevräume

In diesem Kapitel werden gewichtete Sobolevräume gemischter Ordnung eingeführt und untersucht. Diese werden zunächst für ganzzahlige Ordnung definiert und anschließend durch Interpolation auf gebrochene Ordnung verallgemeinert. Das Augenmerk liegt dabei auf solchen Räumen, die auf dem Gesamtraum definiert sind. Im Hinblick auf eine spätere Waveletcharakterisierung der entsprechenden Räume wird mit Hilfe des Lokalisierungsprinzips (Triebel, 1992) eine äquivalente Norm konstruiert, die aus einer gewichteten Summe ungewichteter Normen auf endlichen Würfeln zusammengesetzt ist. Um die erwünschte Äquivalenz dieser so konstruierten Norm zu sichern, muss gefordert werden, dass die Gewichte bezüglich dieser Würfel nur wenig variieren.

Sobolevräume gemischter Ordnung treten auf natürliche Weise bei der Approximation von Funktionen mit Hilfe dünner Gitter auf, siehe zum Beispiel (Babenko, 1960; Bungartz und Griebel, 2004). Wurden bisher vor allem beschränkte Gebiete betrachtet, werden in dieser Arbeit Sobolevräume gemischter Ordnung auf Gesamtraum betrachtet. Die zusätzlich eingeführte räumliche Gewichtsfunktion erlaubt dabei eine Kontrolle über das Abklingverhalten der Funktion und ihrer Ableitungen.

Gewichtete Sobolevräume treten dabei auch zum Beispiel bei der Untersuchung von degenerierten elliptischen Gleichungen auf (Kufner, 1985) oder dienen zur Beschreibung von singulärem Verhalten (Kozlov et al., 1997). Allgemeiner als hier werden in (Triebel, 2006) gewichtete Besov- und Triebel-Lizorkin-Räume eingeführt. Dabei kann die Restriktion der Gewichtsfunktion noch abgeschwächt werden (Schott, 1998; Rychkov, 2001). Gewichtete Sobolevräume werden ebenfalls in (Griebel und Hamaekers, 2009) betrachtet, wobei das Gewicht dort auf Polynome eingeschränkt wird.

Das Kapitel ist wie folgt aufgebaut. Im ersten Abschnitt werden die gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung für ganzzahlige Ableitungsordnung kanonisch eingeführt und durch Interpolationstheorie für gebrochene Ordnung erweitert. Zudem wird die Menge der in dieser Arbeit betrachteten Gewichtsfunktionen eingeschränkt. Wir benötigen im Weiteren eine Charakterisierung der ungewichteten Räume mit Hilfe der Fouriertransformation und geben diese in Abschnitt 2 an. Die ungewichteten Räume spielen dabei eine entscheidende Rolle bei der Konstruktion der lokalisierten Norm in Abschnitt 3.

1. Definition

Die Sobolevräume gemischter Ordnung H_{mix}^m aus Kapitel 2, Abschnitt 3, werden in diesem Abschnitt in mehrfacher Hinsicht verallgemeinert. Erstens werden die Räume so definiert, dass die entsprechenden Funktionen neben der anisotropen Regularität ebenfalls eine gewisse isotrope Regularität besitzen. Zweitens werden die Variablen in Hinsicht auf die Regularitätsergebnisse der Schrödingergleichung, Kapitel 8, in d -Tupel aufgeteilt. Drittens wird im Ortsraum ein Gewicht eingeführt, wodurch das räumliche Verhalten der Funktion und ihrer Ableitungen beschrieben werden kann. Diese Information und genauer das Abklingverhalten solcher Funktionen wird später notwendig sein um eine Approximation zu konstruieren, siehe Kapitel 4 und 5.

Im Wesentlichen werden im Verlauf der Arbeit vorrangig gewichtete Räume gemischter Ordnung auf dem Gesamtraum und ungewichtete auf einem endlichen Würfel benötigt. Die hier gegebene Definition ist jedoch allgemein genug, um beide Fälle zu behandeln. Weiterhin sind auch klassische Sobolevräume dadurch definiert.

Bei der Notation muss beachtet werden, dass (dN) -dimensionale Variablen in N d -Tupel aufgeteilt werden. Dies spiegelt sich in der Schreibweise

$$\vec{x} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N), \quad \mathbf{x}_i = (x_{i,1}, \dots, x_{i,d})$$

wider: N -dimensionale Größen werden mit einem Vektorpfeil gekennzeichnet, d -dimensionale mit einem fetten Buchstaben bezeichnet, während die einzelnen Komponenten dünn geschrieben werden. Somit wird ein (dN) -dimensionaler Vektor fett geschrieben und mit einem Vektorpfeil gekennzeichnet.

Weiterhin werden Multiindizes $\vec{\alpha} \in (\mathbb{N}^d)^N$, wie in Kapitel 2 erklärt, verwendet. Nach der Festlegung der Notation können nun die gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung definiert werden.

DEFINITION 3.1. Sei $d, N \geq 1$, $m, k \in \mathbb{N}$, $\Omega \subset \mathbb{R}^{dN}$ eine offene Menge und w eine positive Gewichtsfunktion auf Ω . Definiere die Menge $A^{k,m} \subset (\mathbb{N}^d)^N$ der Multiindizes mit

$$(3.1) \quad A^{k,m} = \left\{ \vec{\alpha}_{\text{mix}} + \vec{\alpha}_{\text{iso}} \mid \max_{i=1, \dots, N} |\alpha_{\text{mix},i}|_1 \leq k, \sum_{i=1}^N |\alpha_{\text{iso},i}|_1 \leq m \right\}.$$

Der *gewichtete Sobolevraum* $H_{\text{mix}}^{k,m}(\Omega, w)$ *gemischter Ordnung* ist durch die Menge aller messbaren Funktionen u gegeben, so dass $\langle u, u \rangle_{\text{mix}, w, k, m, \Omega}$ mit

$$(3.2) \quad \langle u, v \rangle_{\text{mix}, w, k, m, \Omega} := \sum_{\vec{\alpha} \in A^{k,m}} \int_{\Omega} \partial^{\vec{\alpha}} u(\vec{x}) \partial^{\vec{\alpha}} v(\vec{x}) w(\vec{x}) \, d\vec{x}$$

endlich ist. Weiterhin ist durch den obigen Ausdruck ein Skalarprodukt auf $H_{\text{mix}}^{k,m}(\Omega, w)$ gegeben. Die dadurch erzeugte Norm wird mit $\|\cdot\|_{\text{mix}, w, k, m, \Omega}$ bezeichnet. Im Falle von $\Omega = \mathbb{R}^{dN}$ wird der Index Ω weggelassen, ebenso w im Falle $w = 1$.

Die Aufteilung der der Multiindizes $A^{k,m}$ in eine Summe von $\vec{\alpha}_{\text{mix}}$ und $\vec{\alpha}_{\text{iso}}$ spiegelt die zwei verschiedenen Glattheitsklassen wider. Zum einen gibt der Teil $\vec{\alpha}_{\text{iso}}$ die gewöhnliche, isotrope Glattheit wieder und stellt sicher, dass alle Ableitungen bis zur Ordnung m bezüglich der gewichteten L^2 -Norm existieren. Insbesondere erhält man die gewöhnlichen gewichteten Sobolevräume, falls $k = 0$ gesetzt wird, d.h. es gilt

$$H^m(\Omega, w) = H_{\text{mix}}^{0,m}(\Omega, w).$$

Zum anderen erlaubt die Bedingung an $\vec{\alpha}_{\text{mix}}$ bezüglich eines jeden d -Tupels \mathbf{x}_i zusätzlich m -fach abzuleiten. Die gesamte Ordnung der so gebildeten Ableitungen kann somit bis zu Nm sein. Die in Kapitel 2 eingeführten Räume $H_{\text{mix}}^k((0, 2\pi)^N)$ sind als Spezialfall $H_{\text{mix}}^{k,0}(((0, 2\pi)^1)^N, 1)$ enthalten.

Die Gewichtsfunktion w bestimmt das räumliche Verhalten der Funktion und ihrer Ableitungen. Allgemeiner könnte man auch für verschiedene Ableitungen $\vec{\alpha}$ verschiedene Gewichtsfunktionen $w_{\vec{\alpha}}$ einführen, siehe auch (Triebel, 1992). Speziell für $w = 1$ erhält man die ungewichteten Räume.

Wie im Falle von klassischen Sobolevräumen kann man nun durch Interpolationstheorie¹ auch gewichtete Sobolevräume gemischter Regularität und gebrochener Ordnung einführen.

¹Für eine Einführung in die reelle Interpolationstheorie siehe Anhang A.

DEFINITION 3.2. Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$, $s \geq 0$ und w eine positive Gewichtsfunktion auf einem Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^{dN}$. Für $s \notin \mathbb{N}$ definiere über die Interpolationstheorie

$$H_{\text{mix}}^{s,m}(\Omega, w) = \left[H_{\text{mix}}^{0,m}(\Omega, w), H_{\text{mix}}^{k,m}(\Omega, w) \right]_{\theta,2}, \quad k = \lceil s \rceil, \theta = s/k,$$

den gewichteten Sobolevraum gemischter und gebrochener Ordnung. Dabei bezeichnet $\lceil s \rceil$ die kleinste ganze Zahl, die größer oder gleich s ist.

Alternativ werden ungewichtete Räume gebrochener Ordnung nach Sobolev-Slobodeckij definiert, siehe zum Beispiel (Haroske und Triebel, 2008). Dieser Ansatz kann ebenfalls auf Räume mit Gewicht verallgemeinert werden. Es muss jedoch noch geprüft werden, welche Voraussetzungen an das Gebiet und an die Gewichtsfunktion gestellt werden müssen, damit beide Definitionen äquivalent sind. Im Falle der später betrachteten Gewichtsfunktionen aus Definition 3.3 kann die Äquivalenz mit Hilfe der lokalisierten Norm, siehe Abschnitt 3, gezeigt werden.

In der vorangegangenen Definition kann nur der Index s , der die gemischte Regularität bestimmt, gebrochene Werte annehmen. Jedoch kann durch eine zweite Interpolation ebenfalls gebrochene Ordnung in der isotropen Regularität eingeführt werden. Dies wird jedoch in dieser Arbeit nicht benötigt. Weiterhin sind jedoch gewöhnliche, isotrope Sobolevräume mit gebrochener Ordnung in der Definition enthalten. Setzt man $N = 1$ und $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, so gilt

$$(3.3) \quad H^s(\Omega) = H_{\text{mix}}^{s,0}(\Omega, 1),$$

für die ungewichteten Räume ($w = 1$).

im Weiteren Verlauf der Arbeit werden gewichtete Räume nur auf dem Gesamttraum untersucht und ebenfalls die Menge der Gewichtsfunktionen eingeschränkt.

DEFINITION 3.3. Sei $d, N \geq 1$ und w eine positive Gewichtsfunktion auf \mathbb{R}^{dN} . Die Gewichtsfunktion w heißt *lokal schwach variierend*, falls es eine Konstante C_w gibt, so dass für alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^{dN}$ mit $|\vec{x} - \vec{y}|_\infty \leq 1$

$$(3.4) \quad w(\vec{y}) \leq C_w w(\vec{x})$$

gilt. Insbesondere soll also die Punktauswertung von w wohldefiniert sein.

In der Definition der lokal schwach variierenden Gewichtsfunktionen wird die Umgebung eines Punktes $\vec{x} \in \mathbb{R}^{dN}$ ohne Einschränkung der Allgemeinheit mit Radius eins, der charakteristischen Länge im Ort, gewählt. Jede andere Wahl des Radius führt auf die gleiche Klasse von Funktionen, wobei sich jedoch die Konstante C_w ändert, siehe auch den Beweis von Lemma 3.4. Die Definition ähnelt dabei den lokalen Gewichten, wie sie zum Beispiel in (Rychkov, 2001) eingeführt werden. In der Tat sind lokal schwach variierende Gewichte in der dort verwendeten Notation A_1^{loc} -Gewichte.

LEMMA 3.4. Sei w eine lokal schwach variierende Gewichtsfunktion mit Konstante C_w . Dann gilt für alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^{dN}$ mit $|\vec{x} - \vec{y}|_\infty \leq 1$

$$C_w^{-1} w(\vec{x}) \leq w(\vec{y}) \leq C_w w(\vec{x})$$

Außerdem existiert eine Konstanten $\gamma \in \mathbb{R}$, so dass

$$w(\vec{x}) \lesssim e^{\gamma|\vec{x}|_\infty}$$

für alle $\vec{x} \in \mathbb{R}^{dN}$ gilt.

BEWEIS. Zum Beweis der ersten Behauptung wird \vec{x} und \vec{y} in Gleichung (3.4) vertauscht. Für die zweite wird diese Ungleichung rekursiv angewandt. Wähle dazu das kleinste $n \in \mathbb{N}$ mit $|\vec{x}|_\infty - 1 \leq n$. Dann kann eine Folge $\vec{\ell}_i \in \mathbb{Z}^{dN}$ für $i = 0, \dots, n$ gefunden

werden, so dass

$$\vec{\ell}_0 = \vec{0}, \quad |\vec{\ell}_i - \vec{\ell}_{i-1}|_\infty = 1 \quad i = 1, \dots, n$$

und $|\vec{\ell}_n - \vec{x}|_\infty \leq 1$. Daher gilt mit rekursiver Anwendung der Ungleichung (3.4)

$$w(\vec{x}) \leq w(\vec{0}) \cdot C_w^n = w(\vec{0}) \cdot e^{\log C_w \cdot n}.$$

Weiterhin gilt $n \leq |\vec{x}|_\infty$, woraus mit $\gamma = \log C_w$ die zweite Behauptung folgt. \square

Als Konsequenz des letzten Lemmas ergibt sich, dass das Maximum und Minimum eines lokal schwach variierenden Gewichts auf einem Würfel mit Seitenlänge 2 durch den Wert am Mittelpunkt abgeschätzt werden kann. Weiterhin können Gewichtsfunktionen dieser Art höchstens exponentiell wachsen. Im Folgenden werden nur solche gewichteten Sobolevräume untersucht, deren Gewicht lokal schwach variierend ist.

2. Fourierdarstellung ungewichteter Normen

Bevor im nächsten Abschnitt die gewichteten Räume genauer untersucht werden, wird in diesem Abschnitt für die ungewichteten Räume gemischter Ordnung auf dem Gesamttraum eine äquivalente Norm im Fourierraum hergeleitet. Damit können auf den Sobolevräumen mit gebrochener Ordnung äquivalente Normen mit expliziter Darstellung angegeben werden. Mit Hilfe dieser Darstellung wird weiterhin gezeigt, dass sich die ungewichteten Sobolevräume als Schnitte von Tensorprodukträumen darstellen lassen.

Durch dieses Vorgehen gewinnt man zum einen eine gewisse Intuition über die Eigenschaft der Funktionen gemischter Ordnung und zum anderen werden die Ergebnisse dieses Abschnittes bei der Waveletcharakterisierung der gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung im nächsten Kapitel eine wichtige Rolle spielen.

Als Hilfsmittel wird in diesem Abschnitt die kontinuierliche Fouriertransformation verwendet, siehe zum Beispiel (Weidmann, 2000; Stein und Weiss, 1971) für eine Einführung. Diese ist für alle Funktionen $f \in L^1(\mathbb{R}^{dN}) \cap L^2(\mathbb{R}^{dN})$ durch

$$(3.5) \quad \hat{f}(\vec{\omega}) = (2\pi)^{-dN/2} \int_{\mathbb{R}^{dN}} f(\vec{x}) \cdot e^{-i\langle \vec{\omega}, \vec{x} \rangle} d\vec{x}$$

definiert und auf dem gesamten $L^2(\mathbb{R}^{dN})$ durch Erweiterung des Operators.

Bei den Beweisen wird zuerst der Fall ganzzahliger Ableitungsordnungen betrachtet und dann anschließend auf den Fall gebrochener Ordnung mit Hilfe der Interpolationstheorie verallgemeinert.

Mit Hilfe der Fouriertransformation kann nun folgende äquivalente Norm angegeben werden.

LEMMA 3.5. *Sei $d, N \geq 1$ und $m, k \in \mathbb{N}$. Dann gilt für Funktionen $u \in H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ die Normäquivalenz*

$$\|u\|_{\text{mix},k,m}^2 \sim \int_{\mathbb{R}^{dN}} (1 + |\vec{\omega}|_2^2)^m \cdot \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^k \cdot |\hat{u}(\vec{\omega})|^2 d\vec{\omega},$$

wobei \hat{u} die Fouriertransformierte von u bezeichnet.

BEWEIS. Mit Hilfe der Fouriertransformation lässt sich die Norm auf den ungewichteten Sobolevräumen als

$$\|u\|_{\text{mix},k,m}^2 = \int \left[\sum_{\vec{\alpha} \in A^{k,m}} \vec{\omega}^{2\vec{\alpha}} \right] |\hat{u}(\vec{\omega})|^2 d\vec{\omega}$$

schreiben. Auf Grund der Struktur von $A^{k,m}$ kann man ersten Term des Integranden als

$$\sum_{\vec{\alpha} \in A^{k,m}} \vec{\omega}^{2\vec{\alpha}} = \sum_{|\vec{\alpha}|_1 \leq m} \vec{\omega}^{2\vec{\alpha}} \cdot \sum_{\max |\alpha_i|_1 \leq k} \vec{\omega}^{2\vec{\alpha}}$$

faktorisieren. Die erste Summe kann dabei durch $(1 + |\vec{\omega}|_2^2)^m$ nach oben und unten abgeschätzt werden. Der zweite Teil kann ebenfalls aufgespalten werden:

$$\sum_{\max_{i=1,\dots,N} |\alpha_i|_1 \leq k} \vec{\omega}^{2\vec{\alpha}} = \sum_{|\alpha_1|_1 \leq k} \omega_1^{2\alpha_1} \cdot \left[\sum_{\max_{i=2,\dots,N} |\alpha_i|_1 \leq k} \prod_{i=2}^N \omega_i^{2\alpha_i} \right].$$

Der erste Faktor kann wie oben äquivalent durch $(1 + |\omega_i|_2^2)^m$ ausgedrückt werden. Führt man dies rekursiv fort und setzt alle Faktoren zusammen, so erhält man die Behauptung. \square

Mit Hilfe der Interpolationstheorie kann nun die Aussage des letzten Lemmas verallgemeinert werden.

SATZ 3.6. *Die Aussage von Lemma 3.5 gilt ebenfalls für die Räume $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ mit $s \geq 0$, wenn in der Aussage k durch s ersetzt wird.*

BEWEIS. Nach Definition 3.2 ist die Interpolationsnorm auf $H_{\text{mix}}^{s,m}$ durch

$$\|u\|_{\text{mix},s,m}^2 = \int_0^\infty t^{-1-2\theta} \inf_{v \in H_{\text{mix}}^{k,m}} [\|u - v\|_{\text{mix},0,m}^2 + t^2 \|v\|_{\text{mix},k,m}^2] dt$$

gegeben, wobei $k = \lceil s \rceil$ und $\theta = s/k$ gesetzt wurde. Mit Hilfe von Lemma 3.5 ist durch

$$\inf_{v \in H_{\text{mix}}^{k,m}} \int_{\mathbb{R}^{dN}} (1 + |\vec{\omega}|_2^2)^m \left[|\hat{u}(\vec{\omega}) - \hat{v}(\vec{\omega})|^2 + t^2 \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^k |\hat{v}(\vec{\omega})|^2 \right] d\vec{\omega}.$$

ein äquivalenter Ausdruck für das Infimum im Integranden gegeben. Man bestimmt nun punktweise das Minimum des Integranden und erhält

$$\hat{v}(\vec{\omega}) = \frac{1}{1 + t^2 \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^k} \hat{u}(\vec{\omega}).$$

Man kann zeigen, dass das so definierte v ein Element von $H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ ist. Mit Hilfe dieser Funktion kann nun die Interpolationsnorm einfach ausgerechnet werden und man erhält die Behauptung. \square

Mit Hilfe der Fourierdarstellung der Normen aus dem letzten Satz kann man nun leicht zeigen, dass die ungewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung sich als Schnitte von Tensorprodukträumen darstellen lassen, siehe auch (Griebel und Oswald, 1995) und (Griebel und Knapek, 2000) für den Fall beschränkter Gebiete. Eine Zusammenfassung wichtiger Eigenschaften von Tensorprodukträumen befindet sich im Anhang B.

KOROLLAR 3.7. *Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $s \geq 0$. Der Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ lässt sich als*

$$H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N) = \bigcap_{i=1}^N H^{m \cdot \vec{e}_i + s \cdot \vec{1}}((\mathbb{R}^d)^N), \quad H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N) = \bigotimes_{i=1}^N H^{t_i}(\mathbb{R}^d)$$

darstellen, wobei \vec{e}_i den i -ten Einheitsvektor und $\vec{1} = (1, \dots, 1) \in \mathbb{R}^N$ bezeichne.

BEWEIS. Der Beweis bedient sich der Darstellung der äquivalenten Normen im Fourierraum von Satz 3.6. Nach den Eigenschaften des Tensorprodukts, siehe Anhang B, gilt für jedes $\vec{t} \in \mathbb{R}^N$ mit $\vec{t} \geq 0$ komponentenweise

$$\|u\|_{H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)}^2 \sim \int_{\mathbb{R}^{dN}} \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^{t_i} |\hat{u}(\vec{\omega})|_2^2 d\vec{\omega}.$$

Mit der Abkürzung $\|\cdot\|_{\cap H^{\vec{\ell}}}$ sei die Norm auf dem oben definierten Schnitt der Räume $H^{\vec{\ell}}((\mathbb{R}^d)^N)$ bezeichnet. Dann gilt für diese Norm

$$\|u\|_{\cap H^{\vec{\ell}}}^2 \sim \int_{\mathbb{R}^{dN}} \left[\sum_{j=1}^N \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^{s + \delta_{ij} \cdot m} \right] \cdot |\hat{u}(\vec{\omega})|_2^2 d\vec{\omega}.$$

Der erste Faktor im Integranden kann zu

$$\left[\sum_{j=1}^N (1 + |\omega_j|_2^{2m}) \right] \cdot \prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^s$$

faktoriert werden. Der Term in der eckigen Klammern ist jedoch zu $(1 + |\vec{\omega}|_2^2)^m$ äquivalent, so dass mit Satz 3.6 die Behauptung folgt. \square

3. Lokalisierte Normen

In diesem Abschnitt wird eine äquivalente Norm auf $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ für lokal schwach variierende Gewichtsfunktionen hergeleitet und zwar für alle $s \geq 0$. Dabei stellt sich die Schwierigkeit, dass die gemischte Regularität das Abklingen der Fouriertransformierten bestimmt, während das Gewicht das Verhalten im Ortsraum wiedergibt.

Aus diesem Grunde kann die Fouriertransformation im gewichteten Fall nicht direkt benutzt werden, da sie im Ortsraum nicht lokalisiert ist. Abhilfe schafft das Prinzip der Lokalisierung (*localization principle*) (Triebel, 1992). Dazu zerlegt man den Raum in sich überlappende Würfel und approximiert die Gewichtsfunktion auf jedem einzelnen durch eine Konstante. Somit erhält man auf jedem Würfel eine ungewichtete Norm. Wegen der speziellen Struktur der lokal schwach variierenden Gewichtsfunktion kann man den Fehler zudem nach oben und unten abschätzen. Summiert man die Normen auf dem einzelnen Würfel, so erhält man eine äquivalente Norm.

Die lokalisierte Norm wird im nächsten Kapitel die Grundlage für die Konstruktion äquivalenter diskreter Normen bezüglich anisotroper Wavelets sein. Die Überdeckung des Gesamttraumes durch Würfel kommt dabei der lokalisierten Struktur der Wavelets entgegen. Durch den beschränkten Träger der primalen und dualen Wavelets kann damit aus den wohlbekanntem Normäquivalenzen für die ungewichteten Normen jene für gewichtete hergeleitet werden.

Wir beginnen mit der Definition der lokalisierten Norm.

DEFINITION 3.8. Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$, $s \geq 0$ und w eine lokal schwach variierende Gewichtsfunktion auf \mathbb{R}^{dN} . Definiere für $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$ die Würfel

$$Q_{\vec{\ell}} = \{ \vec{x} \in \mathbb{R}^{dN} \mid |\vec{x} - \vec{\ell}|_{\infty} < 1 \}.$$

und die Norm

$$(3.6) \quad \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 = \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}}^2, \quad w_{\vec{\ell}} = w(\vec{\ell})$$

für genügend glatte Funktionen $u : \mathbb{R}^{dN} \rightarrow \mathbb{R}$.

In einem ersten Schritt wird nun für $s \in \mathbb{N}$ gezeigt, dass die oben definierte Norm äquivalent zu der Norm auf $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ ist. Später kann die Aussage durch Interpolation auch auf gebrochenes s verallgemeinert werden.

LEMMA 3.9. Sei $d, N \geq 1$, $m, k \in \mathbb{N}$ und w eine lokal schwach variierende Gewichtsfunktion auf \mathbb{R}^{dN} . Dann gilt die Normäquivalenz

$$C_w^{-1} \|u\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \lesssim \|u\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \lesssim C_w \|u\|_{\text{mix},w,k,m}^2$$

im Raum $H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$. Hierbei sind die Konstanten unabhängig von C_w und u .

BEWEIS. Im ersten Schritt wird die linke Ungleichung gezeigt. Auf Grund der Überdeckung des Gesamtraumes \mathbb{R}^{dN} durch die Würfel $\{Q_{\vec{\ell}} \mid \vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}\}$ gilt

$$\|u\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \leq \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} \sum_{\vec{\alpha} \in A^{k,m}} \int_{Q_{\vec{\ell}}} |D^{\vec{\alpha}} u(\vec{x})|^2 w(\vec{x}) \, d\vec{x}.$$

Mit der Hölder-Ungleichung und der Eigenschaft der Gewichtsfunktion folgt damit die Behauptung.

Nun wird die rechte Ungleichung gezeigt. Es gilt für alle Multiindizes $\vec{\alpha} \in A^{k,m}$

$$\sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \int_{Q_{\vec{\ell}}} |D^{\vec{\alpha}} u(\vec{x})|^2 \, d\vec{x} = \int_{\mathbb{R}^{dN}} |D^{\vec{\alpha}} u(\vec{x})|^2 \left[\sum_{\vec{\ell}: \vec{x} \in Q_{\vec{\ell}}} w_{\vec{\ell}} \right] \, d\vec{x}.$$

Jeder einzelne Summand in der eckigen Klammer kann nun durch

$$w_{\vec{\ell}} \leq C_w w(\vec{x})$$

abgeschätzt werden, da \vec{x} und $\vec{\ell}$ in der $|\cdot|_{\infty}$ -Norm höchstens Abstand eins besitzen können. Da die Summe nur endlich viele Terme besitzt, folgt die Behauptung durch anschließendes Aufsummieren über die Multiindizes. \square

In einem zweiten Schritt soll nun gezeigt werden, dass die in Definition 3.8 angegebene Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},w,s,m}$ ebenfalls für gebrochene s eine äquivalente Norm darstellt. Dies ist die Hauptaussage dieses Kapitels. Im Hinblick auf die diskreten Normen im nächsten Kapitel ist die Aussage über gebrochene Ordnung notwendig, um die Normäquivalenz für eine möglichst große Spanne von Ordnungen zu erhalten und so den Regularitätsbereich der Wavelets voll auszuschöpfen.

SATZ 3.10. Sei $d, N, m \in \mathbb{N}$, $s \geq 0$ und w eine lokal schwach variierende Gewichtsfunktion. Dann gilt die Normäquivalenz

$$C_w^{-1} \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim C_w \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2$$

im Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$.

BEWEIS. Für $s \in \mathbb{N}$ ist nach Lemma 3.9 nichts mehr zu beweisen. Im anderen Fall setze $k = \lceil s \rceil$ und $\theta = s/k$. Eine zentrale Rolle im Beweis spielen dabei die K -Funktionale

$$K^2(t, u) = \inf_{v \in H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)} \|u - v\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|v\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \quad \text{und}$$

$$K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}) = \inf_{v \in H_{\text{mix}}^{k,m}(Q_{\vec{\ell}})} \|u - v\|_{\text{mix},0,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 + t^2 \|v\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2.$$

Das erste K -Funktional wird verwendet, um die Normen auf dem Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ auf dem Gesamtraum darzustellen. Das zweite K -Funktional führt auf die ungewichtete Norm auf den Räumen $H_{\text{mix}}^{s,m}(Q_{\vec{\ell}})$ auf den Quadern $Q_{\vec{\ell}}$, die später mit den geeigneten Gewichten die Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},w,s,m}$ bilden.

Im ersten Teil des Beweises wird die linke Ungleichung gezeigt. Sei dazu für alle $t \geq 0$ eine Funktion $v^*(t) \in H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ gegeben die das Infimum im K -Funktional bis auf einen Faktor zwei annimmt, d.h. es gelte

$$(3.7) \quad \|u - v^*(t)\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \leq 2K^2(t, u).$$

Mit Hilfe dieser Funktion folgt

$$\begin{aligned} \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 &= \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \int_0^\infty t^{-1-2\theta} K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}) dt \\ &\leq \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \int_0^\infty t^{-1-2\theta} [\|u - v^*(t)\|_{\text{mix},0,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 + t^2 \|v^*(t)\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2] dt. \end{aligned}$$

Auf Grund des Satzes über die Monotone Konvergenz, siehe z.B. (Königsberger, 2004), kann die Summe mit dem Integral vertauscht werden und es gilt

$$\begin{aligned} \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 &\leq \int_0^\infty t^{-1-2\theta} [\|u - v^*(t)\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2] dt \\ &\lesssim C_w \int_0^\infty t^{-1-2\theta} [\|u - v^*(t)\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2] dt, \end{aligned}$$

wobei im zweiten Schritt die Normäquivalenz aus Lemma 3.9 für die auftretenden ganzzahligen Normen angewandt wurde. Schätzt man nun den Integranden durch Gleichung (3.7) ab, so folgt die erste Behauptung.

Nun folgt der Beweis der rechten Ungleichung. Dazu sei für jedes $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$ und für alle $t > 0$ ein $v_{\vec{\ell}}^*(t) \in H_{\text{mix}}^{k,m}(Q_{\vec{\ell}})$ gegeben, so dass

$$(3.8) \quad \|u - v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},0,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 + t^2 \|v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 \leq 2K^2(u, t, Q_{\vec{\ell}})$$

gilt. Sei weiterhin eine unendlich oft differenzierbare Funktion φ gegeben, so dass durch die Funktionen

$$\varphi_{\vec{\ell}} := \varphi(\cdot - \vec{\ell}), \quad \vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$$

eine Partition der Eins gegeben ist. Der Träger von $\varphi_{\vec{\ell}}$ sei dabei vollständig in $Q_{\vec{\ell}}$ enthalten. Aus den lokal definierten Funktionen $(v_{\vec{\ell}}^*(t))_{\vec{\ell}}$ wird nun mit Hilfe der Partition der Eins die global definierte Funktion

$$(3.9) \quad v^*(t) := \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} \varphi_{\vec{\ell}} v_{\vec{\ell}}^*(t)$$

konstruiert. Die so definierte Funktion ist dabei ein Element von $H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$, wie im Folgenden gezeigt wird. Da der Träger von $\varphi_{\vec{\ell}}$ vollständig in $Q_{\vec{\ell}}$ enthalten ist und die Mengen $(Q_{\vec{\ell}})$ eine lokal endliche Überdeckung bilden, folgt aus den Eigenschaften der lokal schwach variierenden Gewichtsfunktion

$$(3.10) \quad \|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \lesssim \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} \|\varphi_{\vec{\ell}} v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \lesssim \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \|v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2,$$

wobei die Beschränktheit von φ und deren Ableitungen zusätzlich in der letzten Abschätzung verwendet wurde. Jeder einzelne Summand kann nun nach Konstruktion durch

$$\begin{aligned} t^2 \|v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 &\leq 2K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}) = 4\theta t^{2\theta} \int_t^\infty \tau^{-1-2\theta} K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}) d\tau \\ &\leq 4\theta t^{2\theta} \int_0^\infty \tau^{-1-2\theta} K^2(\tau, u, Q_{\vec{\ell}}) d\tau = 4\theta t^{2\theta} \|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 \end{aligned}$$

auf Grund der Monotonie des K -Funktionals abgeschätzt werden. Eingesetzt in Gleichung (3.10) ergibt dies die Abschätzung $\|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \lesssim \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2$, wobei die Konstante von t abhängig ist. Mit der Abschätzung $\|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim C_w \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2$ aus dem ersten Teil des Beweises folgt damit, dass $v^*(t)$ für alle $t > 0$ ein Element von

$H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ ist. Damit kann $v^*(t)$ verwendet werden um das K -Funktional nach oben abzuschätzen:

$$\begin{aligned} K^2(t, u) &\leq \|u - v^*(t)\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|v^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2 \\ &\lesssim \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} \|\varphi_{\vec{\ell}}(u - v_{\vec{\ell}}^*(t))\|_{\text{mix},w,0,m}^2 + t^2 \|\varphi_{\vec{\ell}} v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},w,k,m}^2. \end{aligned}$$

Hier wurde wiederum die lokale Endlichkeit von $(\varphi_{\vec{\ell}})_{\vec{\ell}}$ verwendet. Wegen $\text{supp}(\varphi_{\vec{\ell}}) \subset Q_{\vec{\ell}}$, der Hölder-Ungleichung und den Eigenschaften der lokal schwach variierenden Gewichtsfunktion folgt

$$\begin{aligned} K^2(t, u) &\lesssim C_w \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} [\|u - v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},0,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 + t^2 \|v_{\vec{\ell}}^*(t)\|_{\text{mix},k,m,Q_{\vec{\ell}}}^2] \\ &\lesssim C_w \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}), \end{aligned}$$

wobei in der letzten Gleichung die Abschätzung (3.8) verwendet wurde. Somit folgt

$$\|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim C_w \int_0^\infty t^{-1-2\theta} \left[\sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} K^2(t, u, Q_{\vec{\ell}}) \right] dt.$$

Eine Anwendung des Satzes über die Monotone Konvergenz zeigt die zweite Behauptung. \square

Wavelet Entwicklung und diskrete Normen

Im vorliegenden Kapitel werden äquivalente diskrete Normen für die im letzten Kapitel eingeführten gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung hergeleitet. Als Ansatzfunktionen werden dabei anisotrope Tensorprodukte von Wavelets verwendet.

Funktionen in den betrachteten Räumen besitzen eine bestimmte Lokalisierung sowohl im Ortsraum als auch im Fourierraum. Ersteres wird dabei durch die Gewichtsfunktion und zweiteres durch die gegebene Regularität vermittelt. Möchte man aufbauend auf einem Funktionensystem eine diskrete äquivalente Norm entwickeln, so müssen die Basisfunktionen ebenfalls eine solche Lokalisierung aufweisen. Insgesamt liegen somit zwei widerstrebende Forderungen vor, da aus der Heisenbergschen Unschärferelation folgt, dass beide Eigenschaften nicht beliebig gut erfüllt werden können (Mallat, 1999, S.30). Eine perfekte Lokalisierung im Frequenzraum (Fourierpolynome) bedingt eine Delokalisierung im Ortsraum und umgekehrt. Daher muss ein Kompromiss zwischen beiden Extrema gefunden werden.

Diese Aufgabe erfüllen Wavelets oder allgemeiner eine Mehrskalenganalyse (Mallat, 1989), deren Entwicklung auf so verschiedenen Gebieten wie Signalverarbeitung, Physik und reine Mathematik stattgefunden hat. Für eine umfassende Einführung und weiterführende Literaturangaben sei hier auf die Monographien von (Daubechies, 1992; Keinert, 2004; Cohen, 2003) sowie den Artikel (Daubechies, 1996) verwiesen. Das vielleicht bekannteste Beispiel ist die Haar-Basis, die auf verschiedene Weise verallgemeinert wurde. Insbesondere seien hier die orthogonalen Basen mit beschränktem Träger höherer Ordnung (Daubechies, 1988) und biorthogonale Mehrskalenganalysen basierend auf B -Splines höherer Ordnung (Cohen et al., 1992) erwähnt. Man kann nun zeigen, dass solche Funktionensysteme eine Reihe von Funktionenklassen charakterisieren können, darunter auch Sobolevräume. Das heißt es gibt eine Normäquivalenz zwischen gewichteten Entwicklungskoeffizienten bezüglich dieser Basis und den kontinuierlichen Räumen.

In der vorliegenden Arbeit wird im Speziellen die Existenz eines biorthogonalen Funktionensystems vorausgesetzt, für das äquivalente diskrete Normen für Sobolevräume $H^s(\mathbb{R}^d)$, $0 \leq s < \tau$ mit $\tau > 0$, gegeben sind. Zudem wird angenommen, dass sowohl die primalen als auch die dualen Funktionen beschränkten Träger besitzen. Die Existenz solcher Funktionensysteme ist wohlbekannt. Insbesondere werden diese Forderungen für beliebige $\tau < \infty$ von der auf B -Splines aufbauenden biorthogonalen Mehrskalenganalyse erfüllt, falls die Splines genügend hohe Ordnung besitzen (Cohen et al., 1992).

Mit Hilfe dieses Funktionensystems werden durch Bildung des Tensorproduktes anisotrope Funktionen in dN Variablen konstruiert. Die Hauptaussage dieses Kapitels ist, dass dieses Funktionensystem die gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ charakterisiert, solange $m + s < \tau$ gilt.

Der Beweis stützt sich dabei zum einen auf die spezielle Struktur der ungewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung, die als Schnitt von Tensorprodukträumen dargestellt werden können, siehe auch (Griebel und Oswald, 1995; Griebel und Knapke, 2000). Zum anderen kann die gewichtete Norm durch das Prinzip der Lokalisierung als Summe ungewichteter Normen geschrieben werden, wie im letzten Kapitel gezeigt wurde. Auf Grund

der beschränkten Träger der primalen und dualen Basisfunktionen kann auf diese Weise eine Normäquivalenz hergeleitet werden.

Das Kapitel ist dabei wie folgt aufgebaut. Im ersten Abschnitt wird die Notation der Waveletbasis festgelegt und grundlegende Voraussetzungen formuliert. Anschließend wird in Abschnitt 2 gezeigt, dass die anisotropen Tensorprodukte der d -variaten Wavelets die ungewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung charakterisieren. Aufbauend darauf wird mit Hilfe der lokalisierten Normen im letzten Abschnitt 3 die Normäquivalenz zu den gewichteten Räumen gezeigt.

1. Notation und Voraussetzungen

In diesem Abschnitt werden die Voraussetzungen an eine d -variante Mehrskalbasis formuliert aus der im folgenden Abschnitt eine Waveletbasis im $L^2(\mathbb{R}^d)^N$ konstruiert wird. Grundlage ist dabei eine univariate biorthogonale Mehrskalanalyse, aus der durch Bildung des Tensorproduktes d -variante Wavelets entstehen.

Gegeben seien Funktionen $\psi^{(0)}, \psi^{(1)}, \tilde{\psi}^{(0)}, \tilde{\psi}^{(1)} \in L^2(\mathbb{R})$. Dabei wird $\psi^{(0)}$ die (primale) Skalierungsfunktion und $\psi^{(1)}$ das (primale) Wavelet genannt und die Funktionen $\tilde{\psi}^{(0)}, \tilde{\psi}^{(1)}$ die duale Skalierungsfunktion bzw. das duale Wavelet.

Für Indizes $\varepsilon \in \{0, 1\}^d$ definiere die Funktionen

$$\psi^{(\varepsilon)} = \bigotimes_{i=1}^d \psi^{(\varepsilon_i)}, \quad \tilde{\psi}^{(\varepsilon)} = \bigotimes_{i=1}^d \tilde{\psi}^{(\varepsilon_i)}$$

als Tensorprodukt univariater Funktionen. Durch

$$\psi_{j,\mathbf{k}}^{(\varepsilon)}(\mathbf{x}) = 2^{-jd/2} \psi^{(\varepsilon)}(2^j \mathbf{x} - \mathbf{k}), \quad \varepsilon \in \{0, 1\}^d, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$$

und analog für $\tilde{\psi}_{j,\mathbf{k}}^{(\varepsilon)}$ seien dyadisch skalierte und verschobene Funktionen definiert. Dabei gibt ε den Typ der Funktion, j die Stufe und \mathbf{k} die Verschiebung an. Um die Notation zu vereinfachen wird ein Multiindex

$$(4.1) \quad \lambda = (\varepsilon, j, \mathbf{k}) \in \{0, 1\}^d \times \mathbb{Z} \times \mathbb{Z}^d.$$

eingeführt und die entsprechenden Funktionen anschließend mit

$$\psi_\lambda := \psi_{j,\mathbf{k}}^{(\varepsilon)}, \quad \tilde{\psi}_\lambda := \tilde{\psi}_{j,\mathbf{k}}^{(\varepsilon)}, \quad \lambda = (\varepsilon, j, \mathbf{k}).$$

bezeichnet. Die Aufpunkte werden dabei mit

$$(4.2) \quad \mathbf{x}_\lambda = 2^{-j}(k_1, \dots, k_d) \in \mathbb{R}^d, \quad \lambda = (\varepsilon, j, \mathbf{k})$$

bezeichnet. Zur Notation seien auf den Multiindizes Funktionen

$$(4.3) \quad \varepsilon(\lambda) = \varepsilon, \quad j(\lambda) = |\lambda| = j, \quad \mathbf{k}(\lambda) = \mathbf{k}, \quad \lambda = (\varepsilon, j, \mathbf{k})$$

definiert, die die einzelnen Komponenten extrahieren. im Folgenden sei eine Indexmenge

$$(4.4) \quad \nabla := \{(\mathbf{0}, 0, \mathbf{k}) \mid \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d\} \cup \{(\varepsilon, j, \mathbf{k}) \mid \varepsilon \in \{0, 1\}^d \setminus \{\mathbf{0}\}, j \in \mathbb{N}, \mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d\}$$

eingeführt. Die erste Menge der Vereinigung besteht aus den Indizes der Skalierungsfunktionen größter Stufe, während die zweite die Indizes aller Wavelets enthält.

Auf dieser Menge sei für $s \in \mathbb{R}$ der Raum $\ell_s^2(\nabla)$ aller Folgen $(u_\lambda)_{\lambda \in \nabla}$ definiert, so dass

$$\|(u_\lambda)_{\lambda \in \nabla}\|_{\ell_s^2(\nabla)}^2 = \sum_{\lambda \in \nabla} 2^{2|\lambda|s} |u_\lambda|^2$$

endlich ist. Weiterhin ist $\ell_s^2(\nabla)$ ein Hilbertraum, wie man leicht nachprüfen kann.

Mit Hilfe dieser Bezeichnungen sei nun folgende Generalvoraussetzung gestellt.

VORAUSSETZUNG. Gegeben seien Funktionen $\psi^{(0)}, \psi^{(1)}, \tilde{\psi}^{(0)}, \tilde{\psi}^{(1)} \in L^2(\mathbb{R})$ mit beschränktem Träger, so dass für ein ξ

$$(4.5) \quad \text{supp } \psi \subset \{x \in \mathbb{R} \mid |x| \leq \xi\}, \quad \psi \in \{\psi^{(0)}, \psi^{(1)}, \tilde{\psi}^{(0)}, \tilde{\psi}^{(1)}\}$$

gilt, also alle Träger der entsprechenden Funktionen in einem Würfel um den Ursprung mit Seitenlänge 2ξ enthalten sind. Es gelte für die Funktionen

$$(4.6) \quad \langle \tilde{\psi}^{(\varepsilon)}(\cdot - k), \psi^{(\varepsilon')}(\cdot - k') \rangle = \delta_{\varepsilon, \varepsilon'} \cdot \delta_{k, k'} \quad k, k' \in \mathbb{Z}, \varepsilon, \varepsilon' \in \{0, 1\},$$

wobei δ das Kronecker-Delta bezeichne. Die ganzzahligen Verschiebungen der primalen Funktionen $\psi^{(0)}$ und $\psi^{(1)}$ sind somit biorthogonal zu denen der dualen Funktionen $\tilde{\psi}^{(0)}$ und $\tilde{\psi}^{(1)}$. Weiterhin sei $\tau > 0$ gegeben, so dass für alle $0 \leq s < \tau$ die Normäquivalenz

$$(4.7) \quad \|u\|_s \sim \|(u_\lambda)_{\lambda \in \nabla}\|_{\ell_s^2(\nabla)}, \quad u_\lambda := \langle \tilde{\psi}_\lambda, u \rangle_0$$

für alle $u \in H^s(\mathbb{R}^d)$ erfüllt ist.

Aus der Voraussetzung folgt insbesondere, dass die Funktionen $\{\psi_\lambda \mid \lambda \in \nabla\}$ den Raum $L^2(\mathbb{R}^d)$ stabil aufspannen, siehe z.B. (Cohen, 2003). Weiterhin ist durch $\{\tilde{\psi}_\lambda \mid \lambda \in \nabla\}$ ein zu $\{\psi_\lambda \mid \lambda \in \nabla\}$ biorthogonales Funktionensystem gegeben, d.h. es gilt

$$\langle \tilde{\psi}_\lambda, \psi_{\lambda'} \rangle = \delta_{\lambda, \lambda'}, \quad \lambda, \lambda' \in \nabla.$$

Somit kann die Abbildung

$$(4.8) \quad u \mapsto \langle \tilde{\psi}_\lambda, u \rangle_0 \psi_\lambda$$

als (nicht-orthogonaler) Projektor auf den von ψ_λ aufgespannten Raum gesehen werden. Bei der Konstruktion von äquivalenten diskreten Normen auf gewichteten Sobolevräumen wird dabei entscheidend eingegangen, dass diese Abbildung auf Grund des beschränkten Trägers von $\tilde{\psi}_\lambda$ lokal wirkt.

Die Forderung der Normäquivalenz in der obigen Voraussetzung kann ebenfalls als Isomorphismus des Operators

$$(4.9) \quad D : H^s(\mathbb{R}^d) \rightarrow \ell_s^2(\nabla), \quad u \mapsto (\langle \tilde{\psi}_\lambda, u \rangle_0)_{\lambda \in \nabla}$$

für alle $0 \leq s < \tau$ formuliert werden.

Die Existenz solcher Funktionensysteme ist wohlbekannt. Zum Beispiel erfüllen die Daubechies-Wavelets (Daubechies, 1988) und die biorthogonalen Spline-wavelets (Cohen et al., 1992) die Voraussetzungen. Mit kleinen Änderungen der Indexmengen können ebenfalls Multiwavelets, wie zum Beispiel die orthogonalen Spline-wavelets (Donovan et al., 1996), betrachtet werden.

2. Der ungewichtete Fall

In diesem Abschnitt wird mit Hilfe des Tensorproduktes eine anisotrope Waveletbasis für den $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$ konstruiert und die Normäquivalenz zwischen den gewichteten Waveletkoeffizienten und den ungewichteten Räumen gemischter Ordnung $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N)$, $0 \leq s + m < \tau$, hergeleitet. Maßgeblich für den Beweis ist dabei die Tatsache, dass diese Räume über Schnitte von Tensorprodukträumen dargestellt werden können, siehe Korollar 3.7. Da die Waveletbasis nach Konstruktion ebenfalls aus Tensorproduktfunktionen besteht, können die Ergebnisse aus Anhang B angewendet werden.

Die Waveletbasis im $L^2((\mathbb{R}^d)^N)$ sei folgendermaßen definiert:

DEFINITION 4.1. Sei $N \geq 1$ und $\vec{\lambda} \in \nabla^N$ ein mehrdimensionaler Multiindex mit

$$\vec{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_N), \quad \lambda_i = (\varepsilon_i, j_i, \mathbf{k}_i) \in \nabla.$$

Definiere die Funktionen

$$(4.10) \quad \psi_{\vec{\lambda}} = \bigotimes_{i=1}^N \psi_{\lambda_i}, \quad \vec{\lambda} \in \nabla^N.$$

als Tensorprodukt N d -variater Funktionen.

Im Gegensatz zu der Konstruktion der Wavelets in d Variablen aus Abschnitt 1 können sich die Stufen $(j_i)_{i=1, \dots, N}$ in den unterschiedlichen Dimensionen unterscheiden. Dadurch wird der Träger ein anisotroper achsenparalleler Quader.

Es wird sich nun zeigen, dass die Menge $\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^N\}$ die ungewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung in einem gewissen Sinne stabil aufspannt. Zum Beweis wird zuerst eine Normäquivalenz zu den Räumen $H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)$ hergeleitet aus denen nach Korollar 3.7 die Räume $H_{\text{mix}}^{k,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ durch Schnitt entstehen. Zur Vereinfachung der Notation werden folgende Größen eingeführt

DEFINITION 4.2. Sei $N \geq 1$ und $\vec{\lambda} \in \nabla^N$ ein Multiindex. Der Stufenvektor $\vec{j}(\vec{\lambda})$ sei durch

$$(4.11) \quad \vec{j}(\vec{\lambda}) = (|\lambda_1|, \dots, |\lambda_N|).$$

definiert. Weiterhin seien die Größen

$$\kappa_{\text{iso}}(\vec{\lambda}) = 2^{|\vec{j}(\vec{\lambda})|_{\infty}}, \quad \kappa_{\text{mix}}(\vec{\lambda}) = 2^{|\vec{j}(\vec{\lambda})|_1},$$

sowie für $s, m \in \mathbb{R}$ die Abkürzung

$$(4.12) \quad \kappa_{s,m}(\vec{\lambda}) = \kappa_{\text{mix}}^s(\vec{\lambda}) \cdot \kappa_{\text{iso}}^m(\vec{\lambda})$$

definiert.

Die hier eingeführten Größen werden später in der diskreten Norm als Gewichte für die Waveletkoeffizienten dienen. Die Definition der Größen κ_{iso} und κ_{mix} ist dabei analog zu der Aufteilung der Multiindizes $A^{m,k}$ aus Definition 3.1 zu sehen: das Term κ_{iso} steht dabei in Verbindung zur isotropen und κ_{mix} zur anisotropen Regularität.

Es gilt folgende Normäquivalenz.

LEMMA 4.3. Sei $\vec{t} \in \mathbb{R}^N$, wobei $0 \leq \vec{t} < \tau$ komponentenweise gelten soll und τ die Ordnung der Normäquivalenz angibt. Weiterhin sei u ein Element von $H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)$, wobei die Räume in Korollar 3.7 definiert sind. Dann gilt die Normäquivalenz

$$(4.13) \quad \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} 2^{2\langle \vec{t}, \vec{j}(\vec{\lambda}) \rangle} |u_{\vec{\lambda}}|^2 \sim \|u\|_{H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)}^2, \quad u_{\vec{\lambda}} = \langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0.$$

Dabei bezeichnet das Skalarprodukt im Exponenten das euklidische Skalarprodukt auf \mathbb{R}^N .

BEWEIS. Auf den d -dimensionalen Räumen $H^t(\mathbb{R}^d)$ mit $0 \leq t < \tau$ ist der in Gleichung (4.9) definierte Operator D ein Isomorphismus. Analog zur Konstruktion von $H^{\vec{t}}$ werden folgende Hilberträume

$$\ell_{\vec{t}}^2(\nabla^N) := \bigotimes_{i=1}^N \ell_{t_i}^2(\nabla),$$

eingeführt. Nach Definition von Tensorproduktoperatoren gilt

$$D \otimes \dots \otimes D : H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N) \rightarrow \ell_{\vec{t}}^2(\nabla^N), \quad u \mapsto (\langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0)_{\vec{\lambda} \in \nabla^N}.$$

Nach Satz B.2 ist dieser Operator wiederum ein Isomorphismus und es gilt die Normäquivalenz

$$\|u\|_{H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)}^2 \sim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} \left[\prod_{i=1}^N 2^{2t_i |\lambda_i|} \right] |\langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0|^2.$$

Der Term in der Klammer kann nun als $2^{2\langle \vec{t}, \vec{j}(\vec{\lambda}) \rangle}$ geschrieben werden, womit die Behauptung folgt. \square

Mit Hilfe dieses Resultats kann durch Bildung des geeigneten Schnittes folgende Normäquivalenz hergeleitet werden.

SATZ 4.4. *Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $s \geq 0$, so dass $m + s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der d -dimensionalen Normäquivalenz angibt. Dann gilt die Normäquivalenz*

$$(4.14) \quad \|u\|_{\text{mix},s,m}^2 \sim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2, \quad u_{\vec{\lambda}} = \langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0.$$

für $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N)$. Das Gewicht $\kappa_{s,m}(\vec{\lambda})$ ist dabei durch Gleichung (4.12) gegeben.

BEWEIS. Für die Normäquivalenz mit $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N)$ muss nun der Schnitt mehrerer Hilberträume der Form $H^{\vec{t}}((\mathbb{R}^d)^N)$ betrachtet werden, siehe dazu Korollar 3.7. Aus der Voraussetzung $0 \leq m + s < \tau$ folgt für alle benötigten \vec{t} komponentenweise $0 \leq \vec{t} < \tau$ gilt. Damit kann Lemma 4.3 angewandt werden und es folgt nach Definition der Schnitte von Hilberträumen in Lemma B.4

$$\|u\|_{\text{mix},s,m}^2 \sim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} \left[\sum_{i=1}^N 2^{2\langle (m \cdot \vec{e}_i + s \cdot \vec{1}), \vec{j}(\vec{\lambda}) \rangle} \right] |\langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0|^2.$$

Der Term in der Klammer kann nun äquivalent durch

$$\sum_{i=1}^N 2^{2\langle (m \cdot \vec{e}_i + s \cdot \vec{1}), \vec{j}(\vec{\lambda}) \rangle} \sim 2^{2m|\vec{j}(\vec{\lambda})|_{\infty} + 2s|\vec{j}(\vec{\lambda})|_1} = \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda})$$

ausgedrückt werden, womit die Behauptung folgt. \square

3. Der gewichtete Fall

In diesem Abschnitt wird die Kernaussage dieses Kapitels bewiesen: die Normäquivalenz gewichteter Waveletkoeffizienten zu gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung. Der Beweis beruht dabei auf dem Zusammenspiel der lokalisierten Norm von Kapitel 4, Abschnitt 3, der Normäquivalenz zu ungewichteten Räumen des letzten Abschnittes und der Tatsache, dass sowohl die primalen als auch die dualen Wavelets beschränkten Träger besitzen.

Die Aufpunkte der Wavelets in \mathbb{R}^{dN} seien analog zu Gleichung (4.2) als

$$(4.15) \quad \vec{x}_{\vec{\lambda}} = (\mathbf{x}_{\lambda_1}, \dots, \mathbf{x}_{\lambda_n}) \in \mathbb{R}^{dN}$$

definiert. Mit Hilfe dieser Notation kann folgende Normäquivalenz formuliert werden.

SATZ 4.5. *Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $s \geq 0$, so dass $m + s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der d -dimensionalen Normäquivalenz angibt. Weiterhin sei w ein lokal schwach variierende Gewichtsfunktion auf \mathbb{R}^{dN} . Dann gilt für $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w)$ die Normäquivalenz*

$$(4.16) \quad C_w^{-n\epsilon} \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \lesssim C_w^{n\epsilon} \|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2,$$

wobei $u_{\vec{\lambda}} = \langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0$ und $n_\xi = \lceil \xi \rceil + 3$ ist. Das Gewicht $\kappa_{s,m}(\vec{\lambda})$ ist dabei durch Gleichung (4.12) und ξ durch den Träger der Wavelets, siehe Gleichung (4.5), gegeben.

BEWEIS. Im ersten Teil des Beweises wird die linke Ungleichung gezeigt. Definiere zu diesem Zweck für alle $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$ die Indexmenge

$$\nabla_{\vec{\ell}} = \{ \vec{\lambda} \in \nabla^N \mid \text{supp}(\psi_{\vec{\lambda}}) \cap Q_{\vec{\ell}} \neq \emptyset \}.$$

der Indizes aller Wavelets, deren Träger den Würfel $Q_{\vec{\ell}}$ schneiden. Dann gilt

$$(4.17) \quad \|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}} = \left\| \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla_{\vec{\ell}}} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}} \right\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}} \leq \left\| \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla_{\vec{\ell}}} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}} \right\|_{\text{mix},s,m},$$

wobei die letzte Ungleichung aus der Monotonie des K -Funktionalen und damit der Normen bezüglich des Gebietes folgt. Aus der Normäquivalenz aus Satz 4.4 folgt die Abschätzung

$$\|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}}^2 \lesssim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla_{\vec{\ell}}} \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2.$$

Nun summiert man über alle Verschiebungen $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$ mit den passenden Gewichten $w_{\vec{\ell}}$ auf und erhält nach Definition 3.8 der Norm $\|\cdot\|_{\text{mix},w,s,m}$

$$\|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} \left[\sum_{\vec{\ell}: \vec{\lambda} \in \nabla_{\vec{\ell}}} w_{\vec{\ell}} \right] \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2$$

wobei hier schon die Indizes $\vec{\lambda}$ umsortiert wurden. Ein fester Waveletindex $\vec{\lambda} \in \nabla^N$ liegt nur in solchen Indexmengen $\nabla_{\vec{\ell}}$, für die $|\vec{x}_{\vec{\lambda}} - \vec{\ell}|_\infty \leq \xi + 1$ gilt. Aus der Eigenschaft der lokal schwach variierenden Gewichtsfunktion folgt damit

$$\|u\|_{\text{mix},w,s,m}^2 \lesssim C_w^{\lceil \xi \rceil + 1} \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2.$$

Setzt man die Normäquivalenz aus Satz 3.10 ein und verschlechtert die Konstante aus Gründen der Symmetrie von $C_w^{\lceil \xi \rceil + 2}$ auf $C_w^{\lceil \xi \rceil + 3}$ (es gilt $C_w \geq 1$) erhält man die erste Ungleichung.

im Folgenden wird die rechte Ungleichung bewiesen. Die zentrale Idee ist dabei, dass die Projektoren auf die Waveleträume, siehe Gleichung (4.9), lokal wirken. Setze für $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$

$$\tilde{\nabla}_{\vec{\ell}} = \{ \vec{\lambda} \in \nabla^N \mid \vec{x}_{\vec{\lambda}} \in Q_{\vec{\ell}} \},$$

das heißt die Indizes aller Wavelets, deren Zentren im Würfel $Q_{\vec{\ell}}$ liegen. Für diese Menge von Indizes definiere die Vereinigung aller Träger der zugehörigen biorthogonalen Funktionen:

$$\tilde{Q}_{\vec{\ell}} = \bigcup \{ \text{supp } \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}} \}.$$

Es gilt mit der Eigenschaft der Gewichtsfunktion

$$(4.18) \quad \sum_{\vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \leq C_w \sum_{\vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}} w_{\vec{\ell}} \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2,$$

wobei die Koeffizienten durch $u_{\vec{\lambda}} = \langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0$ gegeben sind. Da die dualen Wavelets $\tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}$ beschränkten Träger besitzen, sind die Koeffizienten $u_{\vec{\lambda}}$ für $\vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}$ nur von der Restriktion von u auf $\tilde{Q}_{\vec{\ell}}$ abhängig. Konstruiere nun eine unendlich oft stetig differenzierbare Funktion φ , so dass

$$\varphi(\vec{x}) = \begin{cases} 1 & \vec{x} \in \tilde{Q}_{\vec{0}} \\ 0 & \inf_{\vec{y} \in \tilde{Q}_{\vec{0}}} |\vec{x} - \vec{y}|_\infty \geq 1 \end{cases}$$

und definiere die Translationen $\varphi_{\vec{\ell}} = \varphi(\cdot - \vec{\ell})$ für $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$. Da $\varphi_{\vec{\ell}}$ auf $\tilde{Q}_{\vec{\ell}}$ den Wert eins annimmt gilt also

$$u_{\vec{\lambda}} = \langle \psi_{\vec{\lambda}}, \varphi_{\vec{\ell}} u \rangle_0, \quad \vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}$$

für alle $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$. Setzt man dies nun in Gleichung (4.18) ein, so erhält man

$$\sum_{\vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \leq C_w w_{\vec{\ell}} \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |\langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, \varphi_{\vec{\ell}} u \rangle_0|^2,$$

wobei hier schon die Summation auf alle Indizes $\vec{\lambda} \in \nabla^N$ erweitert wurde, was den Ausdruck jedoch nur vergrößert. Mit Hilfe der Normäquivalenz für den ungewichteten Fall aus Satz 4.4 folgt damit

$$\sum_{\vec{\lambda} \in \tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \lesssim C_w w_{\vec{\ell}} \|\varphi_{\vec{\ell}} u\|_{\text{mix},s,m}^2 \lesssim C_w w_{\vec{\ell}} \|u\|_{\text{mix},s,m,\text{supp } \varphi_{\vec{\ell}}}^2,$$

wobei bei der zweiten Abschätzung die Hölder-Ungleichung angewandt wurde. Die anschließende Summation über alle $\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}$ liefert

$$\sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \lesssim C_w \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \|u\|_{\text{mix},s,m,\text{supp } \varphi_{\vec{\ell}}}^2.$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass jeder Index $\vec{\lambda}$ in höchstens endlich vielen Indexmengen $\tilde{\nabla}_{\vec{\ell}}$ enthalten sein kann. Nun überdeckt man die Träger $\text{supp } \varphi_{\vec{\ell}}$ mit den Würfeln $Q_{\vec{\ell}}$ und erhält

$$\sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \lesssim C_w \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} \left[\sum_{\vec{\ell}': Q_{\vec{\ell}'} \cap \text{supp } \varphi_{\vec{\ell}} \neq \emptyset} w_{\vec{\ell}'} \right] \|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}}^2.$$

Nach Definition von $\varphi_{\vec{\ell}'}$ gilt für festes $\vec{\ell}$ für alle Indizes $\vec{\ell}'$ in der obigen Summe $|\vec{\ell} - \vec{\ell}'|_{\infty} \leq \xi + 1$. Durch die Eigenschaften der Gewichtsfunktion folgt

$$\sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2 \lesssim C_w^{[\xi]+2} \sum_{\vec{\ell} \in \mathbb{Z}^{dN}} w_{\vec{\ell}} \|u\|_{\text{mix},s,m,Q_{\vec{\ell}}}^2.$$

Setzt man noch die Normäquivalenz zwischen den Normen $\|\cdot\|_{\text{mix},w,s,m}$ und $\|\cdot\|_{\text{mix},w,s,m}$ aus Satz 3.10 ein, so folgt die zweite Ungleichung. \square

Mit diesem Ergebnis ist gezeigt, dass die Waveletkoeffizienten die gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung charakterisieren. Dabei setzt sich der Gewichtungsfaktor zum Koeffizienten $|u_{\vec{\lambda}}|^2$ aus den Teilen $w(\vec{x}_{\vec{\lambda}})$ und $\kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda})$ zusammen. In den ersten geht dabei nur die Position des Trägers und im zweiten nur der Stufenvektor des Wavelets ein.

Approximation durch Wavelets

In diesem Kapitel wird mit Hilfe der anisotropen Waveletbasen des letzten Kapitels eine Approximante für Funktionen in gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung konstruiert und die Konvergenzrate explizit berechnet. Da die Funktionen auf dem Gesamttraum definiert sind, muss zusätzlich ein gewisses Abklingverhalten im Ort, vermittelt durch die Gewichtsfunktion, gefordert werden. Wir beschränken uns bei der Diskussion bezüglich der Gewichtsfunktionen auf eine Familie von exponentiell wachsenden Funktionen wie sie auch in der Regularitätsaussage von Eigenfunktionen der Schrödingergleichung vorkommen, siehe Kapitel 9.

Wie schon im einführenden Kapitel 2 spielt die Charakterisierung der entsprechenden Normen durch gewichtete Waveletkoeffizienten die zentrale Rolle, genauer die im letzten Kapitel hergeleiteten Normäquivalenzen. Die Gewichte der Waveletkoeffizienten in der Normäquivalenz aus Gleichung (4.16) geben bei der Charakterisierung der exponentiell gewichteten Sobolevräume gemischter Ordnung eine a priori Informationen über die Größe der einzelnen Waveletkoeffizienten. Analog zum Vorgehen in Kapitel 2 kann man damit sowohl eine Auswahl der relevanten Basisfunktionen treffen als auch den Fehler der Approximation kontrollieren.

Als Approximationsräume ergeben sich dünne Gitter. Diese treten auf natürliche Weise bei der Approximation von Funktionen mit gemischter Regularität auf, siehe zum Beispiel (Babenko, 1960; DeVore et al., 1998; Zenger, 1990), und können sogar explizit über Optimierungsstrategien hergeleitet werden (Bungartz, 1998).

In den genannten Arbeiten wird jedoch immer angenommen, dass die Funktion auf einem beschränkten Gebiet approximiert werden soll. Im Gegensatz dazu ist in der vorliegenden Arbeit das Gebiet unbeschränkt. Jedoch bestimmt die betrachtete, exponentielle Gewichtsfunktion ein Abklingverhalten im Ort. Dadurch erhält man ein dünnes Gitter, das simultan Restriktionen an die Stufen und an die Verschiebung der berücksichtigten Wavelets stellt. Generell können Wavelets grober Stufe weiter vom Zentrum entfernt sein als solche feiner Stufe. Mit zunehmend besserer Auflösung wird sowohl der örtliche Diskretisierungsbereich erweitert als auch Wavelets feinerer Stufe nahe des Ursprungs hinzugefügt.

Die Hauptaussage dieses Kapitels ist, dass die Konvergenzrate bis auf logarithmische Terme unabhängig von der Anzahl der Dimensionen ist. Wie schon in Kapitel 2 ist somit der Fluch der Dimensionen zu einem gewissen Grade gebrochen. Bei der Diskussion der Approximationsraten beschränken wir uns dabei auf den Fall, dass der Fehler bezüglich der Norm des gewöhnlichen Sobolevraums H^m gemessen wird und die zu approximierende Funktion im Raum $H_{\text{mix}}^{s,m'}$ mit $m = m'$ liegt. Der allgemeinere Fall, $m \neq m'$, kann analog zu den Arbeiten (Bungartz und Griebel, 1999; Griebel und Knapek, 2000) betrachtet werden. Unter bestimmten Voraussetzungen können so dünne Gitter hergeleitet werden, deren Komplexität keinen logarithmischen Faktor aufweist.

Der Rest dieses Kapitels ist nun wie folgt aufgebaut. In ersten Abschnitt werden die speziellen, exponentiellen Gewichtsfunktionen und die entsprechenden Räume eingeführt. Bei der Approximation wird sich in der Indexmenge ein dünnes Gitter ergeben, für das in Abschnitt 2 ein abstrakter Rahmen gegeben wird. Anschließend werden in Abschnitt 3 die Indexmengen so bestimmt, dass dabei simultan im Ort und in den Stufen ein dünnes Gitter

entsteht. Eine einfachere Struktur der Indexmenge entsteht, wenn der Raum auf Grund des Abklingverhaltens von vornherein auf ein festes Gebiet beschränkt wird. Bei geeigneter Wahl des Gebietes können so mit klassischen dünnen Gittern bis auf logarithmische Faktoren die gleichen Approximationsraten wie im vorangegangenen Abschnitt erzielt werden, wie Abschnitt 4 zeigt. Im letzten Abschnitt 5 wird untersucht, welche Auswirkung die Missachtung der Gruppierung in d -Tupel hat. Es wird sich herausstellen, dass dabei die Voraussetzungen an die Regularität bzw. die Anzahl der verschwindenden Momente der Wavelets zum Preis einer um logarithmischen Terme schlechteren asymptotischen Approximationsrate abgeschwächt werden kann.

Wie schon im letzten Kapitel soll für alle Aussagen dieses Kapitels angenommen werden, dass die Voraussetzungen aus Kapitel 4, Abschnitt 1 erfüllt sind.

1. Exponentiell gewichtete Sobolevräume

In diesem Abschnitt wird eine Familie von Gewichtsfunktionen eingeführt. Die Diskussion der gewichteten Sobolevräume wird im Weiteren auf diese Gewichte beschränkt. Insbesondere werden Approximationsraten bezüglich der anisotropen Waveletbasis nur für diese Räume bestimmt. Für die betrachteten lokal schwach variierende Gewichtsfunktionen aus Definition 3.3 zeigt Lemma 3.4, dass derartige Funktionen höchstens exponentiell anwachsen können. Im Folgenden wollen wir diesen Grenzfall untersuchen und werden die Diskussion auf diese Klasse von Gewichtsfunktionen beschränken.

Eine Festlegung auf ein bestimmtes Abklingverhalten, vermittelt durch die Gewichtsfunktion, ist notwendig, um eine endliche Approximation zu erhalten. Für die explizite Bestimmung der Mächtigkeit geeigneter Indexmengen bei der Approximation wird darüber hinaus zusätzliche Information über das genaue Verhalten der Gewichtsfunktion benötigt. Im Hinblick auf die Regularität der Eigenfunktionen der Schrödingergleichung wird dabei folgende Familie von Funktionen betrachtet.

DEFINITION 5.1. Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma \geq 0$. Definiere auf \mathbb{R}^{dN} die Gewichtsfunktion

$$(5.1) \quad w_\gamma(\vec{x}) = \prod_{i=1}^N e^{\gamma|\mathbf{x}_i|^2}.$$

Für $m \in \mathbb{N}$ und $s \geq 0$ werde der Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ als *exponentiell gewichteter Sobolevraum gemischter Ordnung* bezeichnet.

Der Parameter γ bestimmt in der obigen Definition wie schnell die Funktion w_γ anwächst. Wird w_γ als Gewichtsfunktion benutzt, so ist γ der bestimmende Parameter für eine räumliche Lokalisierung für Funktionen in den entsprechenden Räumen $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$: durch $1/\gamma$ ist eine charakteristische Länge gegeben auf denen die Funktion und ihre Ableitungen abklingen. Aus diesem Grund wird in allen folgenden Abschätzungen die Abhängigkeit der auftretenden Konstanten von γ immer explizit angegeben.

im Folgenden wird gezeigt, dass w_γ eine lokal schwach variierende Gewichtsfunktion nach Definition 3.3 ist.

LEMMA 5.2. Sei $d, N \geq 1$, $\gamma \geq 0$ und w_γ die aus Gleichung (5.1) gegebene Gewichtsfunktion. Dann gilt

$$w_\gamma(\vec{y}) \leq C_\gamma w_\gamma(\vec{x}), \quad C_\gamma = e^{\gamma\sqrt{d}N}.$$

für alle $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^{dN}$ mit $|\vec{x} - \vec{y}|_\infty \leq 1$.

BEWEIS. Es gilt für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ auf Grund der Dreiecksungleichung

$$|\mathbf{y}|_2 \leq |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 + |\mathbf{x}|_2.$$

Mit der Abschätzung $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 \leq \sqrt{d} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_\infty$ folgt damit sofort für alle $\vec{\mathbf{x}}, \vec{\mathbf{y}} \in \mathbb{R}^{dN}$ mit $|\vec{\mathbf{x}} - \vec{\mathbf{y}}|_\infty \leq 1$

$$w_\gamma(\vec{\mathbf{y}}) \leq \prod_{i=1}^N (e^{\gamma|\mathbf{x}_i|_2} \cdot e^{\gamma\sqrt{d}}) = e^{\gamma\sqrt{d}N} w_\gamma(\vec{\mathbf{x}})$$

und somit die Behauptung. \square

2. Allgemeine Dünngiterräume

In diesem Abschnitt werden allgemeine Dünngiterräume als abgeschnittene Summe von Tensorprodukträumen eingeführt. Darauf aufbauend werden in den folgenden beiden Abschnitten Räume zur Approximation von exponentiell abklingenden Funktionen mit gemischter Ableitung konstruiert.

Zur Definition seien Räume Z und $\{V^{(i)}\}_{i \in \mathbb{N}}$ gegeben, so dass

$$(5.2) \quad \bigotimes_{i=1}^N V^{(i)} \subset Z$$

gilt. Für jeden Raum $V^{(i)}$ sei weiterhin eine (i.A. nicht geschachtelte) Folge von endlich-dimensionalen Unterräumen gegeben, das heißt es gelte

$$V_\ell^{(i)} \subset V^{(i)}, \quad \ell = 0, 1, 2, \dots$$

Aufbauend auf diesen Unterräumen können wir nun folgende Räume definieren.

DEFINITION 5.3. Der *Dünngitterraum* G_L der *Stufe* L aufbauend auf den Räumen $\{V_\ell^{(1)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}, \dots, \{V_\ell^{(N)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ ist durch

$$(5.3) \quad G_L := \sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} Z_{\vec{\ell}}, \quad \text{mit} \quad Z_{\vec{\ell}} = \bigotimes_{i=1}^N V_{\ell_i}^{(i)}$$

definiert. Für $\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N$ ist $|\vec{\ell}|_1$ die Stufe des Tensorproduktraumes $Z_{\vec{\ell}}$. Weiterhin wird N die (*Dünngitter-*) *Dimension* genannt.

Die entstehenden Räume sind in Abbildung 1 für den Fall $N = 2$ und $L = 2$ als graue Würfel gezeichnet. Der Vollgitterraum zur selben Stufe ist durch alle Würfel mit durchgezogenen Rand gegeben. Anhand dieses Beispiels kann man sehen, dass bei dünnen Gittern wesentlich weniger Tensorprodukträume berücksichtigt werden müssen.

In den meisten Fällen stimmen sowohl die Räume $V^{(i)}$ als auch die Unterräume $\{V_\ell^{(i)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ für alle Dimensionen $i = 1, \dots, N$ überein. Zum Beispiel sind in der klassischen Dünngitterkonstruktion die Räume durch $V^{(i)} = H_0^1([0, 1])$ und $Z = H_0^1([0, 1]^N)$ gegeben. Die Unterräume V_ℓ sind dabei durch die eindimensionale hierarchische Hütchenbasis gegeben. Jedoch schließt die obige Definition auch andere Konstruktionen ein, wie zum Beispiel hierarchische Basen höherer Ordnung (Bungartz, 1998) oder auch Prewavelets (Niedermeier, 1999). Weiterhin fallen darunter auch Konstruktionen, für die die Räume $V^{(i)}$ aus Funktionen in mehreren Variablen aufgebaut sind, zum Beispiel aus Wavelets (Schwab und Todor, 2003) oder Finiten Elementen (Harbrecht et al., 2008). Im Falle parabolischer Probleme wurden in (Griebel und Oeltz, 2007) auch verschiedene Räume $V^{(i)}$ benutzt, in diesem Fall eine eindimensionale Mehrskalenbasis für die zeitliche Komponente und eine dreidimensionale für die räumliche Komponente. In unserem Fall werden die Unterräume $V_\ell^{(i)}$ für festes ℓ für alle $i = 1, \dots, N$ identisch sein.

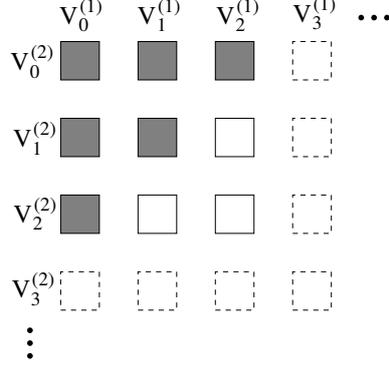


ABBILDUNG 1. Die Menge der ausgefüllten Würfel stellen das dünne Gitter G_2 der Stufe zwei ($L = 2$) für zwei Dimensionen ($N = 2$) dar, siehe auch Definition 5.3. Der Vollgitterraum zur selben Stufe ist durch die Menge aller Würfel mit durchgezogenem Rand gegeben.

3. Dünnes Gitter in Ort und Stufe

Ausgehend von der Normäquivalenz aus Gleichung (4.16) wird in diesem Abschnitt für eine exponentiell abklingende Funktion gemischter Regularität explizit eine Approximante konstruiert und die Konvergenzrate abgeschätzt. Die Indexmenge ergibt sich dabei im Sinne des letzten Abschnittes als ein verallgemeinertes dünnes Gitter, simultan im Ort und in der Stufe der Wavelets. Das Vorgehen zur Bestimmung der Indexmenge als auch der Konvergenzrate ist dabei zu Kapitel 2 sehr ähnlich.

Im Sinne der verallgemeinerten Dünngitterräume werden zuerst die entsprechenden Unterräume $(V_\ell)_{\ell \in \mathbb{N}}$ definiert.

DEFINITION 5.4. Sei $s, \gamma > 0$. Definiere für $\ell \in \mathbb{N}$ die Indexmenge

$$(5.4) \quad \phi_\ell = \{\lambda \in \nabla \mid 2^{2\ell} \leq w_\gamma(\mathbf{x}_\lambda) 2^{2s|\lambda|} < 2^{2(\ell+1)}\}$$

und die entsprechenden Räume

$$V_\ell := \text{span}\{\psi_\lambda \mid \lambda \in \phi_\ell\}$$

für $\ell \in \mathbb{N}$.

Die Mengen ϕ_0, ϕ_1, \dots überdecken die Menge der Indizes ∇ vollständig. Logarithmiert man die Bedingung an die Indizes λ in der Definition der Menge ϕ_ℓ aus Gleichung (5.4) so erhält man

$$(5.5) \quad \ell \leq \tilde{\gamma} |\mathbf{x}_\lambda|_2 + s j(\lambda) < \ell + 1, \quad \tilde{\gamma} = \frac{1}{2} \gamma \cdot \log_2 e.$$

Man sieht, dass die Auswahl im Ort und in der Stufe gekoppelt ist. Für einen Index λ in ϕ_ℓ muss das Zentrum \mathbf{x}_λ des entsprechenden Wavelets ψ_λ desto näher am Ursprung liegen, je höher die Stufe $j(\lambda)$ ist, d.h. je feiner die zugehörige Auflösung ist. In Abbildung 2 sind die Indexmengen ϕ_0, ϕ_1 und ϕ_2 für den Fall $d = 1, s = 1$ und $\tilde{\gamma} = 1$ skizziert.

Im folgenden Lemma werden die Indexmengen des daraus konstruierten dünnen Gitters charakterisiert.

LEMMA 5.5. Sei $s, \gamma > 0$. Für das aus den Räumen $\{V_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ von Definition 5.4 gemäß Definition 5.3 konstruierte dünne Gitter G_L der Stufe $L \in \mathbb{N}$ gilt

$$G_L = \text{span}\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Phi_L\}, \quad Z_{\vec{\ell}} = \{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\ell} \in \Phi_{\vec{\ell}}\}$$

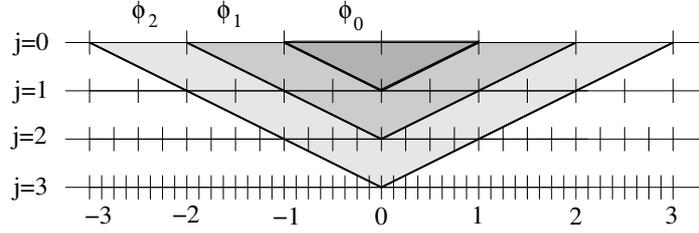


ABBILDUNG 2. Skizze der Indexmengen ϕ_0 , ϕ_1 und ϕ_2 für den Fall $d = 1$, $s = 1$ und $\gamma = 2/\log_2 e$. Die einzelnen Ebenen $j = 0, \dots, 3$ entsprechen den einzelnen Stufen der Ansatzfunktionen und jedem Strich das Zentrum einer Ansatzfunktion. In den jeweiligen Mengen sind alle Indizes enthalten, die im schraffierten Bereich oder an der Innengrenze liegen.

mit den Indexmengen

$$(5.6) \quad \Phi_L = \bigcup_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} \phi_{\vec{\ell}}, \quad \text{und} \quad \phi_{\vec{\ell}} = \prod_{i=1}^N \phi_{\ell_i},$$

wobei die Mengen ϕ_{ℓ} in Gleichung (5.4) definiert sind.

In Abbildung 3 ist das dünne Gitter für $N = 2$, $d = 1$, $s = 1$ und $\gamma = 2/\log_2 e$ skizziert, wobei jeder Punkt für den Aufpunkt eines Wavelets steht. Man sieht, dass mit zunehmender Stufe sowohl das Diskretisierungsgebiet vergrößert wird, als auch mehr Funktionen nahe des Ursprungs hinzugefügt werden.

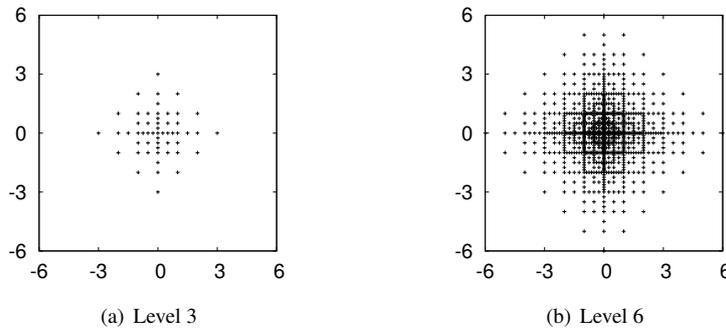


ABBILDUNG 3. Skizze der Indexmengen Φ_3 (a) und Φ_6 (b) für den Fall $N = 2$, $d = 1$, $s = 1$ und $\gamma = 2/\log_2 e$. Dabei entspricht jedem Punkt der Mittelpunkt eines Trägers.

Mit Hilfe dieser Indexmenge wird nun eine Approximante auf dem dünnen Gitter konstruiert, dessen Genauigkeit abhängig vom Parameter L explizit bestimmt werden kann.

SATZ 5.6. Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma > 0$. Weiterhin sei $m \in \mathbb{N}$ und $s > 0$ so, dass $m + s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Für eine Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ konstruiere die Approximante u_L mit

$$(5.7) \quad u_L := \sum_{\vec{\lambda} \in \Phi_L} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}}, \quad u_{\vec{\lambda}} = \langle \psi_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0.$$

Dann gilt die Fehlerabschätzung

$$(5.8) \quad \|u - u_L\|_m \lesssim C_\gamma^{n_\xi/2} 2^{-L} \cdot \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$$

bezüglich der $H^m(\mathbb{R}^{dN})$ -Norm, wobei n_ξ wie in Satz 4.5 definiert ist. Die Konstante ist dabei unabhängig von L und γ .

BEWEIS. Durch die Biorthogonalität und die Normäquivalenz aus Gleichung (4.14) gilt die Abschätzung

$$\|u - u_L\|_m^2 = \left\| \sum_{\vec{\lambda} \notin \Phi_L} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}} \right\|^2 \lesssim \sum_{\vec{\lambda} \notin \Phi_L} 2^{2m|\vec{j}(\vec{\lambda})|_\infty} |u_{\vec{\lambda}}|^2.$$

Indizes $\vec{\lambda} \notin \Phi_L$ liegen nach Gleichung (5.6) in Mengen $\phi_{\vec{\ell}}$ mit $|\vec{\ell}|_1 > L$. Somit gilt für $\vec{\lambda} \notin \Phi_L$

$$2^{2s|\vec{j}(\vec{\lambda})|_1} w_\gamma(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \geq 2^{2L}$$

so dass

$$\|u - u_L\|_m^2 \lesssim 2^{-2L} \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w_\gamma(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2$$

folgt. Dabei ist das Gewicht $\kappa_{s,m}$ in Gleichung (4.12) gegeben. Mit Hilfe der Normäquivalenz aus Gleichung (4.16) folgt somit die Behauptung. \square

Die Approximation wird somit bezüglich der Norm von H^m gemessen, wobei die zu approximierenden Funktionen ausgehend von H^m zusätzlich noch s Ableitungen gemischter Ordnung besitzen. Um die Konvergenzrate zu bestimmen muss nun die Mächtigkeit der Menge Φ_L asymptotisch in L bestimmt werden.

LEMMA 5.7. Sei $s, \gamma > 0$. Für $L \in \mathbb{N}$ besitzt die Indexmenge Φ_L aus Gleichung (5.6) asymptotisch

$$\#\Phi_L \lesssim \gamma^{-dN} \cdot L^{N-1} 2^{dL/s}$$

Elemente, wobei die Konstante unabhängig von L und γ ist.

BEWEIS. Die Berechnung der Mächtigkeit von Φ_L wird in zwei Teilschritte zerlegt. Zuerst wird gezeigt, dass sich die Anzahl der Indizes in ϕ_ℓ aus Gleichung (5.4) für $\ell \in \mathbb{N}$ asymptotisch durch

$$\#\phi_\ell \lesssim \gamma^{-d} \cdot 2^{d\ell/s}$$

abschätzen lässt, wobei die Konstante unabhängig von ℓ und γ ist. Sei dazu ein Index $\lambda \in \phi_\ell$ mit $|\lambda| = j$ gegeben. Löst man die Bedingung (5.5) an die Indizes λ in ϕ_ℓ nach $|\mathbf{x}_\lambda|_2$ auf, ergibt sich

$$(5.9) \quad \frac{\ell - js}{\tilde{\gamma}} \leq |\mathbf{x}_\lambda|_2 \leq \frac{\ell + 1 - js}{\tilde{\gamma}}, \quad \text{mit} \quad \tilde{\gamma} = \gamma \log_2 e / 2.$$

Die Anzahl der Indizes $\lambda \in \nabla$ mit $|\lambda| = j$, die die obige Gleichung erfüllen, kann nun folgendermaßen abgeschätzt werden: Sei $\mathbf{k} = \mathbf{k}(\lambda)$ die Verschiebung und nach Definition $\mathbf{x}_\lambda = 2^{-j}\mathbf{k}$. Es wird die Anzahl aller ganzzahliger Indizes $\mathbf{k} \in \mathbb{Z}^d$ gesucht, für die $2^{-j}|\mathbf{k}|_2$ in einer Kugelschale um den Ursprung liegt, dessen innerer und äußerer Radius durch den linken bzw. rechten Term in Gleichung (5.9) gegeben ist.

Asymptotisch kann diese Anzahl beschränkt werden durch das Volumen der Kreisschale dividiert durch das Volumen 2^{-dj} einer Einheitszelle. Das Volumen ergibt sich dabei asymptotisch als das Produkt der Oberfläche einer Kugel mit dem inneren Radius $(\ell - js)/\tilde{\gamma}$

und der Dicke $1/\tilde{\gamma}$ als Differenz des äußeren und inneren Radius. Insgesamt kann damit die Anzahl der Translationen k durch

$$\lesssim \left(\frac{\ell + 1 - js}{\gamma} \right)^{d-1} \cdot \frac{1}{\gamma} \cdot 2^{jd}$$

abgeschätzt werden. Anschließend muss noch über die möglichen Stufen $j \in \mathbb{N}$ mit $\ell \leq js \leq \ell + 1$ aufsummiert werden:

$$\sum_{j=\lceil \ell/s \rceil}^{\lfloor \ell/s \rfloor} \left(\frac{\ell + 1 - js}{\gamma} \right)^{d-1} \cdot \frac{1}{\gamma} \cdot 2^{jd} \lesssim \gamma^{-d} \cdot 2^{\ell d/s},$$

was die Behauptung liefert.

Im zweiten Schritt kann damit die Mächtigkeit von Φ_L berechnet werden, da Φ_L als Vereinigung von Kreuzprodukten der Mengen ϕ_ℓ definiert ist. Eine solches Kreuzprodukt $\phi_{\vec{\ell}}$ hat asymptotisch

$$\#\phi_{\vec{\ell}} \lesssim \prod_{i=1}^N \gamma^{-d} \cdot 2^{d\ell_i/s} = \gamma^{-dN} \cdot 2^{d|\vec{\ell}|_1/s}$$

Elemente und ist daher nur von der Norm $|\vec{\ell}|_1$ abhängig. Damit gilt für die Anzahl der Elemente in Φ_L

$$(5.10) \quad \#\Phi_L \lesssim \gamma^{-dN} \sum_{\ell=0}^L 2^{d\ell/s} \cdot \#\{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \mid |\vec{\ell}|_1 = \ell\}$$

Aus kombinatorischen Überlegungen folgt, dass die Mächtigkeit der Menge aller ganzzahligen und nichtnegativen N -Tupel $\vec{\ell}$, deren Summe ℓ ergibt, durch

$$(5.11) \quad \#\{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \mid |\vec{\ell}|_1 = \ell\} = \binom{\ell + N - 1}{N - 1} \sim \ell^{N-1}$$

asymptotisch in ℓ abgeschätzt werden kann. Insgesamt ergibt sich daher

$$\#\Phi_L \lesssim \gamma^{-dN} \sum_{\ell=0}^L \ell^{N-1} 2^{d\ell/s} \sim \gamma^{-dN} L^{N-1} 2^{dL/s},$$

wobei die auftretende Konstanten unabhängig von L und γ ist. \square

Mit Hilfe der Abschätzung der Mächtigkeit der Indexmenge Φ_L kann man nun die Konvergenzrate berechnen. Dies ist die zentrale Approximationsaussage dieses Kapitels.

SATZ 5.8. Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma > 0$. Weiterhin sei $m \in \mathbb{N}$ und $s > 0$ so, dass $m+s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Für $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Linearkombination aus Funktionen $\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^N\}$, so dass $\|u - u_\varepsilon\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$ gilt. Dabei kann asymptotisch die Anzahl der benötigten Summanden in u_ε für $\varepsilon \rightarrow 0$ durch

$$\#u_\varepsilon \lesssim C_\gamma^{dn_\varepsilon/(2s)} \gamma^{-dN} |\log \varepsilon|^{N-1} \varepsilon^{-d/s}$$

abgeschätzt werden, wobei n_ε wie in Satz 4.5 definiert ist. Die auftretende Konstante ist dabei unabhängig von ε und γ .

BEWEIS. Setze c als die in Gleichung (5.8) auftretende Konstante, d.h. c ist ein Vielfaches von $C_\gamma^{n_\varepsilon/2}$. Wähle $L \in \mathbb{N}$ mit $L = \lceil -\log_2 \varepsilon + \log_2 c \rceil$; das heißt es gilt $c \cdot 2^{-L} \leq \varepsilon$. Nach Satz 5.6 gilt für die entsprechend definierte Funktion u_L aus Gleichung (5.7) die Fehlerabschätzung

$$\|u - u_L\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}.$$

Die Menge der benötigten Indizes ist dabei durch die Mächtigkeit von Φ_L gegeben, die nach Lemma 5.7 asymptotisch durch

$$\#\mathcal{u}_L \lesssim \gamma^{-dN} \cdot L^{N-1} \cdot 2^{dL/s}$$

beschränkt werden kann. Aus der Definition von L folgt $L \leq -\log_2 \varepsilon + \log_2 c + 1$ und nach Einsetzen damit die Behauptung. \square

Dieses Resultat zeigt, dass der Fluch der Dimensionen zum Teil gebrochen ist: Der Exponent von ε hängt nicht mehr von der Anzahl der Dimensionen N ab. Lediglich im logarithmische Term $|\log \varepsilon|$ taucht im Exponenten die Dimension auf, vergleiche dazu auch Kapitel 2. Stellt man das Ergebnis wie in Kapitel 2 nach der Anzahl der Unbekannten $n \sim L^{N-1} 2^{dL/s}$ um, so erhält man asymptotisch eine Genauigkeit

$$(5.12) \quad \|u - u_n\|_m \lesssim (\log n)^{s(N-1)} \cdot n^{-s/d}$$

in der Anzahl der Summanden. Bis auf logarithmische Terme ist somit die Rate durch s/d unabhängig von N gegeben.

Dabei muss jedoch betont werden, dass die auftretenden Konstanten exponentiell von der Anzahl der Dimension abhängen. Dies folgt direkt aus der Beobachtung, dass die Kondition der Normäquivalenz (4.16) im Allgemeinen ebenfalls exponentiell von N abhängt, siehe dazu Korollar B.3 im Anhang B. Im Falle $\gamma < 1$ sieht man direkt, dass sich die Anzahl der Terme im Bezug auf die Abklingrate wie γ^{-dN} verhält. Die Konstante steigt demnach exponentiell in der Anzahl der Dimensionen. Somit ist zwar die Rate bis auf logarithmische Terme unabhängig von der Anzahl der Dimensionen, jedoch nicht die Konstanten. Weiterhin kann für bestimmte Funktionen, wie zum Beispiel der Gaußschen Glockenkurve in dN Dimensionen, die gemischte Norm ebenfalls exponentiell mit der Anzahl der Dimension wachsen.

Möchte man nun die Approximation bezüglich einer anderen Norm als H^m bestimmen so kann man analog zu (Griebel und Knappek, 2000) vorgehen. In bestimmten Fällen kann die Approximationsrate dahingehend verbessert werden, dass die logarithmischen Terme verschwinden. Auch im vorliegenden Fall sollte diese Technik das gewünschte Ergebnis liefern.

4. Approximation auf einem endlichen Gebiet

In diesem Abschnitt werden Approximationsräume konstruiert, für die zuerst der Bereich der Diskretisierung beschränkt wird und anschließend dieses Gebiet mit Hilfe eines klassischen dünnen Gitters diskretisiert wird. Im Gegensatz zum letzten Abschnitt erfolgt die Auswahl der Ansatzfunktionen somit in zwei Schritten. Im ersten Schritt werden nur solche Waveletfunktionen berücksichtigt, deren Zentrum im vorgegebenen Gebiet liegt. Im zweiten Schritt werden von diesen Funktionen solche ausgewählt, deren Stufe unter einer bestimmten Schranke liegt. Dieses Vorgehen kann im Hinblick auf einfachere Datenstrukturen bei der tatsächlichen Realisierung Vorteile bringen und wurde zum Beispiel auch im Rahmen der Diskretisierung der Schrödingergleichung verwendet (Griebel und Hamackers, 2007).

In der folgenden Diskussion wird untersucht, wie sich die beiden Faktoren, Beschränkung des Diskretisierungsbereichs und Beschränkung der Stufe des dünnen Gitters, auf die Genauigkeit der Approximante auswirken. Werden beide Parameter geeignet gewählt, so erhält man – bis auf logarithmische Faktoren – die gleichen Approximationsraten wie im letzten Abschnitt. Das Vorgehen bei der Konstruktion und der Herleitung von Approximationsraten ist dabei fast identisch mit dem des letzten Abschnittes.

Dieses Ergebnis rechtfertigt somit das Vorgehen, das Gebiet a priori als endlich anzusehen. Um jedoch optimale Raten zu erhalten, sollte man die im letzten Abschnitt konstruierte Approximationsräume nutzen.

im Folgenden werden dünne Gitter aufbauend auf den folgenden Räumen untersucht.

DEFINITION 5.9. Sei $s, \gamma > 0$ und ein Radius $R > 0$ gegeben. Definiere für $\ell \in \mathbb{N}$ die Indexmenge

$$(5.13) \quad \theta_{\ell,R} := \left\{ \lambda \in \nabla \mid 2^{2\ell} \leq 2^{2s|\lambda|} < 2^{2(\ell+1)}, |\mathbf{x}_\lambda|_2 \leq R \right\}.$$

und die entsprechenden Räume

$$V_{\ell,R} := \text{span}\{\psi_\lambda \mid \lambda \in \theta_{\ell,R}\}$$

für $\ell \in \mathbb{N}$.

In der Indexmenge $\theta_{\ell,R}$ werden daher nur die Indizes solcher Wavelets berücksichtigt, deren Zentren innerhalb einer Kugel mit Radius R liegen und deren Stufe $|\lambda|$ zwischen ℓ/s und $(\ell+1)/s$ liegen. Mit Hilfe dieser Unterräume wird nun ein dünnes Gitter aufgebaut. Die entsprechenden Indexmengen werden im nächsten Lemma bestimmt.

LEMMA 5.10. Sei $s, \gamma > 0$ und ein Radius $R > 0$ gegeben. Für das aus den Räumen $\{V_{\ell,R}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ von Definition 5.9 gemäß Definition 5.3 konstruiere dünne Gitter $G_{L,R}$ der Stufe $L \in \mathbb{N}$ gilt

$$G_{L,R} = \text{span}\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Theta_{L,R}\}, \quad Z_{\vec{\ell},R} = \text{span}\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \theta_{\vec{\ell},R}\}$$

mit den Indexmengen

$$(5.14) \quad \Theta_{L,R} = \bigcup_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} \theta_{\vec{\ell},R}, \quad \text{und} \quad \theta_{\vec{\ell},R} = \bigtimes_{i=1}^N \Theta_{\ell_i,R},$$

wobei die Mengen $\theta_{\ell,R}$ in Gleichung (5.13) definiert sind.

Im so definierten dünnen Gitter ergibt sich das Diskretisierungsgebiet als Tensorprodukt d -dimensionaler Kugeln mit Radius R , d.h. nur Wavelets deren Zentren in diesem Gebiet liegen werden in dem so konstruierten dünnen Gitter berücksichtigt. Zusätzlich müssen die Indizes $\vec{\lambda}$ in der Indexmenge $\Theta_{L,R}$ die Bedingung $|\vec{j}(\vec{\lambda})|_1 \leq (L+N)/s$ erfüllen, d.h. ein klassisches dünnes Gitter der Stufe $(L+N)/s$ bilden.

Mit Hilfe dieser Indexmenge kann nun eine Approximante konstruiert werden, wobei der Fehler in den Parametern L und R kontrolliert werden kann.

LEMMA 5.11. Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma > 0$. Weiterhin sei $m \in \mathbb{N}$ und $s > 0$ so, dass $m + s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Für eine Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ konstruiere dabei folgende Approximante $u_{L,R}$ mit

$$(5.15) \quad u_{L,R} := \sum_{\vec{\lambda} \in \Theta_{L,R}} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}}, \quad u_{\vec{\lambda}} = \langle \tilde{\psi}_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0.$$

Dann gilt die Fehlerabschätzung

$$(5.16) \quad \|u - u_{L,R}\|_m \lesssim C_\gamma^{n_\xi/2} \max\{e^{-\gamma R/2}, 2^{-L}\} \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$$

bezüglich der $H^m(\mathbb{R}^{dN})$ -Norm. Die Konstante ist dabei unabhängig von L, R und γ .

BEWEIS. Durch die Normäquivalenz aus Gleichung (4.14) gilt die Abschätzung

$$\|u - u_{L,R}\|_m^2 = \left\| \sum_{\vec{\lambda} \notin \Theta_{L,R}} u_{\vec{\lambda}} \psi_{\vec{\lambda}} \right\|^2 \lesssim \sum_{\vec{\lambda} \notin \Theta_{L,R}} 2^{2m|\vec{j}(\vec{\lambda})|_\infty} |u_{\vec{\lambda}}|^2.$$

Nach Definition von $\Theta_{L,R}$ aus Gleichung (5.14) gilt für jeden Index $\vec{\lambda} \notin \Theta_{L,R}$ entweder

$$2^{2s|\vec{j}(\vec{\lambda})|_1} > 2^{2L} \quad \text{oder} \quad w_\gamma(\vec{\mathbf{x}}_{\vec{\lambda}}) > e^{\gamma R}.$$

Somit folgt

$$\|u - u_L\|_m^2 \lesssim \max\{2^{-2L}, e^{-\gamma R}\} \sum_{\vec{\lambda} \in \nabla^N} w_{\vec{\gamma}}(\vec{x}_{\vec{\lambda}}) \kappa_{s,m}^2(\vec{\lambda}) |u_{\vec{\lambda}}|^2$$

folgt. Mit Hilfe der Normäquivalenz aus Gleichung (4.16) folgt somit die Behauptung. \square

Um die Konvergenzrate zu bestimmen, muss nun die Mächtigkeit der Indexmenge $\Theta_{L,R}$ in Abhängigkeit der Parameter L, R und γ bestimmt werden.

LEMMA 5.12. *Sei $s, \gamma > 0$. Für $L \in \mathbb{N}$ und $R > 0$ besitzt die Indexmenge $\Theta_{L,R}$ aus Gleichung (5.14) asymptotisch*

$$\#\Theta_{L,R} \lesssim L^{N-1} 2^{dL/s} R^{dN}$$

Elemente, wobei die Konstante von L, R und γ unabhängig ist.

BEWEIS. Der Beweis wird analog zu Lemma 5.7 geführt. Man erhält für die in Definition 5.9 gegebene Menge $\theta_{\ell,R}$

$$\#\theta_{\ell,R} \lesssim 2^{d\ell/s} R^d$$

und somit für das Tensorprodukt $\theta_{\vec{\ell},R}$ aus Gleichung (5.14)

$$\#\theta_{\vec{\ell},R} \lesssim 2^{d|\vec{\ell}|_1/s} R^{dN}.$$

Folgt man nun der Argumentation aus Lemma 5.7, so folgt die Behauptung. \square

Die Güte der Approximation einer Funktion auf dem Raum $G_{L,R}$ wird durch die Parameter L und R bestimmt. Bei einer effizienten Approximation wird man nun versuchen, dass die dadurch entstehenden Fehler in etwa gleich groß sind. Diese Strategie führt auf folgende Approximationsrate.

SATZ 5.13. *Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma > 0$. Weiterhin sei $m \in \mathbb{N}$ und $s > 0$ so, dass $m + s < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Für $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_{\gamma})$ existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Linearkombination aus Funktionen $\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^N\}$, so dass $\|u - u_{\varepsilon}\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{\text{mix}, w_{\gamma}, s, m}$ gilt. Dabei kann asymptotisch die Anzahl der Summanden in u_{ε} für $\varepsilon \rightarrow 0$ durch*

$$\#u_{\varepsilon} \lesssim C_{\gamma}^{dn_{\varepsilon}/(2s)} \cdot \gamma^{-dN} \cdot |\log \varepsilon|^{(d+1)N-1} \cdot \varepsilon^{-d/s}$$

abgeschätzt werden, wobei n_{ε} wie in Satz 4.5 definiert ist. Die auftretende Konstante ist dabei unabhängig von ε und γ .

BEWEIS. Setze c als die in Gleichung (5.16) auftretende Konstante, d.h. c ist ein Vielfaches von $C_{\gamma}^{m_{\varepsilon}/2}$. Wähle $K \in \mathbb{N}$ mit $K = \lceil -\log_2 \varepsilon + \log_2 c \rceil$, das heißt es gilt $c \cdot 2^{-K} \leq \varepsilon$. Setze nun

$$L = K, \quad R = \frac{2 \log_2 e}{\gamma} K.$$

Dann gilt $c \max\{2^{-L}, e^{-\gamma R/2}\} \leq c \cdot 2^{-K} \leq \varepsilon$. Nach Lemma 5.11 gilt somit für die entsprechend definierte Funktion $u_{L,R}$ aus Gleichung (5.15) die Fehlerabschätzung

$$\|u - u_{L,R}\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{w_{\gamma}, \text{mix}, s, m}.$$

Die Menge Menge der benötigten Indizes ist dabei durch die Mächtigkeit von $\Theta_{L,R}$ gegeben, die nach Lemma (5.12) asymptotisch durch

$$\#u_{L,R} \lesssim K^{N-1} 2^{dK/s} (K/\gamma)^{dN}$$

beschränkt werden kann. Aus der Definition von K folgt $K \leq -\log_2 \varepsilon + \log_2 c + 1$ und nach Einsetzen damit die Behauptung. \square

Man sieht, dass auch bezüglich dieser Approximation die Rate in führender Ordnung s/d beträgt, wie auch in Satz 5.8. Jedoch verschlechtert sich die Approximationsrate um den logarithmischen Faktor $|\log \varepsilon|^{dN}$.

5. Approximation durch vollständig anisotrope Basen

In den bisherigen Ergebnissen zur Approximation wird die dN -dimensionale Variable \vec{x} in N d -Tupel aufgeteilt. Diese Aufteilung führt im Falle der Schrödingergleichung auf natürliche Regularitätsklassen, bei denen die x -, y - und z -Koordinate eines jeden Elektrons zusammengefasst werden. Man kann sich nun fragen, wie sich die Approximationsgeschwindigkeit ändert, wenn eine Funktion in N d -Tupeln als Funktion in dN Variablen gesehen wird. Die Ergebnisse dieses Abschnittes werden zeigen, dass sich die Approximationsrate nur in den logarithmischen Termen verschlechtert. Jedoch können die Voraussetzungen an die Mehrskalanalyse gelockert werden.

Bei der Notation müssen nun die Räume mit Gruppierung in d -Tupel und ohne Gruppierung unterschieden werden. Dies geschieht durch Klammerung wie in $(\mathbb{R}^d)^N$ oder durch Weglassen der Klammer wie in \mathbb{R}^{dN} .

Wir beginnen damit, die Regularität einer Funktion in dN Variablen durch die in N d -Tupeln abzuschätzen.

LEMMA 5.14. *Sei $m \in \mathbb{N}$ und $s, \gamma \geq 0$. Dann ist der Raum $H_{\text{mix}}^{s',m}(\mathbb{R}^{dN}, w_{\gamma'})$ stetig in $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ eingebettet, falls*

$$s' = s/d, \quad \gamma' = \gamma/\sqrt{d},$$

gewählt wird.

BEWEIS. Im Beweis wird zunächst für ganzzahlige Werte $m, k \in \mathbb{N}$ die stetige Einbettung von

$$H_{\text{mix}}^{k,m}(\mathbb{R}^{dN}, w_\gamma) \subset H_{\text{mix}}^{dk,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_{\sqrt{d}\gamma})$$

gezeigt. Anschließend folgt die Behauptung durch Interpolation. Für $u \in H_{\text{mix}}^{k,m}(\mathbb{R}^{dN}, w_\gamma)$ gilt nach Definition

$$\partial^{\vec{\alpha}} u \in L^2(\mathbb{R}^{dN}, w_\gamma)$$

für Indizes $\vec{\alpha} \in A^{k,m}$, siehe Gleichung (3.1), mit

$$\vec{\alpha} = \vec{\alpha}_{\text{mix}} + \vec{\alpha}_{\text{iso}}, \quad \max_{\substack{i=1,\dots,N \\ \beta=1,\dots,d}} |\alpha_{\text{mix},i,\beta}| \leq k, \quad \sum_{i=1}^N \sum_{\beta=1}^d \alpha_{\text{iso},i,\beta} \leq m.$$

Nun fasst man den Index $\vec{\alpha}$ in d -Tupel zusammen. Alle Multiindizes $\vec{\alpha}$ der oben definierten Form sind ebenfalls in der Menge

$$\left\{ \vec{\alpha} = \vec{\alpha}_{\text{mix}} + \vec{\alpha}_{\text{iso}} \mid \max_{i=1,\dots,N} |\alpha_{\text{mix},i}|_1 \leq dk, \quad \sum_{i=1}^N |\alpha_{\text{iso},i}|_1 \leq m \right\}$$

enthalten. Diese Menge bestimmt aber die Multiindizes, die bei der Norm des Raums $H_{\text{mix}}^{dk,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ auftreten, d.h. in dem Raum gemischter Regularität bezüglich d -Tupel. Für die Gewichtsfunktion folgt für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$

$$\prod_{\beta=1}^d w_\gamma(x_\beta) = e^{\gamma \sum_{\beta=1}^d |x_\beta|} \leq e^{\gamma \sqrt{d} |\mathbf{x}|_2} = w_{\sqrt{d}\gamma}(\mathbf{x})$$

aus der Ungleichung zwischen der ℓ_1 -Norm und der ℓ_2 -Norm und den Eigenschaften der Gewichtsfunktion. Aus den obigen Argumenten folgt somit

$$\|u\|_{H_{\text{mix}}^{k,m}(\mathbb{R}^{dN}, w_\gamma)} \lesssim \|u\|_{H_{\text{mix}}^{dk,m}(\mathbb{R}^d, w_{\sqrt{d}\gamma})}$$

das heißt die stetige Einbettung der den entsprechenden Räumen. Durch die Interpolationstheorie kann die Aussage auch auf nicht ganzzahlige k verallgemeinert werden, so dass die Behauptung folgt. \square

Die Einbettung gibt nun die Grundlage, eine Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ durch eine vollständig anisotrope Waveletbasis zu approximieren. Dazu wird u nun nicht mehr als Funktion in N d -Tupel gesehen, sondern als Funktion in dN Variablen in der Regularitätsklasse $H_{\text{mix}}^{s/d,m}(\mathbb{R}^{dN}, w_{\gamma/\sqrt{d}})$. In der Folge wird die Funktion nun bezüglich der Waveletbasis $\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^{dN}\}$ approximiert, deren Basiselemente durch ein (dN) -faches anisotropes Tensorprodukt gebildet werden. Jeder einzelne Index $\vec{\lambda} \in \nabla^{dN}$ besteht somit aus dN Indizes λ_{i,β_i} mit $i = 1, \dots, N$ und $\beta = 1, \dots, d$. Führt man nun auf diese Weise die Approximation durch, so erhält man analog zu den Sätzen 5.8 und 5.13 folgende Konvergenzraten.

KOROLLAR 5.15. *Sei $d, N \geq 1$ und $\gamma > 0$. Weiterhin sei $m \in \mathbb{N}$ und $s > 0$ so, dass $m + s/d < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Für $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Linearkombination aus Funktionen $\{\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^{dN}\}$, so dass $\|u - u_\varepsilon\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$ gilt. Dabei kann die Anzahl der Summanden in u_ε asymptotisch für $\varepsilon \rightarrow 0$ durch*

$$\#u_\varepsilon \lesssim C_\gamma^{dn_\varepsilon/(2s)} \cdot \gamma^{-dN} \cdot |\log \varepsilon|^{dN-1} \cdot \varepsilon^{-d/s}$$

abgeschätzt werden oder durch

$$\#u_\varepsilon \lesssim C_\gamma^{dn_\varepsilon/(2s)} \cdot \gamma^{-dN} \cdot |\log \varepsilon|^{2dN-1} \cdot \varepsilon^{-d/s}$$

wenn man das Gebiet im Sinne von Gleichung (5.14) vorher festlegt. Die auftretenden Konstanten sind dabei unabhängig von ε und γ . Hierbei ist n_ε wie in Satz 4.5 definiert.

BEWEIS. Nach Lemma 5.14 gilt

$$\|u\|_{H_{\text{mix}}^{s/d,m}(\mathbb{R}^{dN}, w_{\gamma/\sqrt{d}})} \lesssim \|u\|_{H_{\text{mix}}^{s,m}(\mathbb{R}^d, w_\gamma)}$$

Aus den Sätzen 5.13 und 5.8 folgen die angegebene Approximationsraten da die Voraussetzung $m + s/d < \tau$ erfüllt ist; dabei muss $d \leftarrow 1$, $N \leftarrow dN$, $s \leftarrow s/d$ und $\gamma \leftarrow \gamma/\sqrt{d}$ gesetzt werden. \square

Der Satz besagt also, dass bis auf logarithmische Terme die gleiche Konvergenzrate erreichbar ist, aber die Anforderungen an die Mehrskalenganalyse von $m + s < \tau$ auf $m + s/d < \tau$ gesenkt werden kann. Man verliert in beiden Fällen den logarithmischen Faktor $|\log \varepsilon|^{(d-1)N}$.

Galerkin Methode auf dünnen Gittern

Die Resultate über die Approximation multivariater Funktionen im letzten Kapitel legen nahe, die anisotropen Wavelets als Ansatzfunktionen in einem Galerkin-Verfahren zu benutzen. Speziell werden in diesem Kapitel elliptische Gleichungen und elliptische Eigenwertprobleme in hohen Dimensionen und deren Diskretisierung mittels dünner Gittern untersucht.

Dieses Kapitel fasst im Wesentlichen bekannte Resultate aus der Theorie der Finiten Elemente zusammen, wie sie zum Beispiel in Lehrbüchern wie (Brenner und Scott, 2008) aufgeführt werden. Diese Ergebnisse werden jedoch im Hinblick auf die hier verwendeten Ansatzfunktionen speziell für dünne Gitter bezüglich anisotroper Waveletbasen formuliert.

Ein Augenmerk liegt insbesondere auf der Konstruktion effizienter Prädiktionierer im Hinblick auf die Verwendung iterativer Löser. Ausgehend von der Normäquivalenz der diskreten Norm bezüglich der Waveletkoeffizienten und gewöhnlichen Sobolevnormen, siehe Kapitel 4, wird gezeigt, dass durch geeignetes diagonales Skalieren ein Vorkonditionierer mit stufenunabhängiger Kondition gegeben ist. Zusammen mit schnellen Routinen zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts, die im nächsten Kapitel untersucht werden, ergibt sich somit ein effizientes Verfahren zur Lösung elliptischer Gleichungen.

In den letzten Jahren wurde neben der Galerkin-Approximation eine weitere Methode entwickelt um adaptive Verfahren zu konstruieren. Grundlage dafür ist wiederum die in Kapitel 4 gezeigte Normäquivalenz, oder genauer, der Isomorphismus zwischen geeignet gewichteten Waveletkoeffizienten und Sobolevräumen, siehe auch Gleichung (4.9). Damit können die Probleme äquivalent im Folgenraum ℓ^2 formuliert werden und dort Iterationsverfahren zur Lösung durchgeführt werden. Eine erste komplette Analyse ist dabei erstmals in (Cohen et al., 2001) durchgeführt worden. Die Vorgehensweise wurde in (Rohwedder et al., 2010; Dahmen et al., 2008) auf Eigenwertprobleme verallgemeinert und (Schwab und Stevenson, 2008) beschäftigt sich mit hochdimensionalen Problemen. Diese Ergebnisse können auch auf die in dieser Arbeit verwendeten Ansatzfunktionen erweitert werden.

Das Kapitel ist wie folgt aufgebaut. Im ersten Abschnitt wird kurz das elliptische Problem eingeführt und anschließend das Gleichungssystem zur Bestimmung der approximativen Lösung aufgestellt. In Abschnitt 2 wird ein stufenunabhängiger Prädiktionierer bestimmt. Im letzten Abschnitt 3 werden elliptische Eigenwertprobleme, und genauer die näherungsweise Bestimmung der kleinsten Eigenwerte und dazugehöriger Eigenfunktionen, untersucht.

1. Problemstellung und Approximationsresultate

Wir betrachten folgendes Problem. Sei ein Raum Z mit Norm $\|\cdot\|$ gegeben. Mit Z' sei der Dualraum und mit $\langle \cdot, \cdot \rangle$ die duale Paarung auf $Z' \times Z$ bezeichnet. Wir nehmen an, dass $Z = H^m(\mathbb{R}^{dN})$ für ein $m \in \mathbb{N}$ gilt.

Sei nun ein linearer und stetiger Operator T gegeben mit $T : Z \rightarrow Z'$, der zudem stark positiv ist; d.h. es gelte

$$\langle Tu, u \rangle \gtrsim \|u\|^2 \quad \text{für alle } u \in Z.$$

Zudem sei T symmetrisch im dem Sinne, dass für alle $u, v \in Z$

$$\langle Tu, v \rangle = \langle Tv, u \rangle$$

gilt. Somit ist durch die Bilinearform

$$t : Z \times Z \rightarrow \mathbb{R}, \quad (u, v) \mapsto \langle Tu, v \rangle$$

ein Skalarprodukt auf Z gegeben. Die dadurch erzeugte Norm wird Energienorm genannt und ist äquivalent zur ursprünglichen Norm $\|\cdot\|$ auf Z .

Die Aufgabe besteht nun darin, für ein $f \in Z'$ eine Approximation an die Lösung u von

$$(6.1) \quad Tu = f \quad \text{in } Z'$$

zu finden. Dabei wird angenommen, dass die Lösung u zusätzlich gemischte Regularität besitzt und deren Ableitungen exponentiell abfallen; das heißt es existieren Konstanten $s, \gamma > 0$, so dass u im Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ liegt.

Eine Näherungslösung der Aufgabe (6.1) wird nun mit Hilfe der Galerkinmethode bestimmt, wobei als Testräume die im letzten Kapitel eingeführten Approximationsräume verwendet werden. Mit dem Lemma von Cea folgt aus der Approximationseigenschaft der Räume die Fehlerabschätzung für die Näherungslösung. Der folgende Satz fasst die Ergebnisse zusammen.

SATZ 6.1. *Setze $Z_h = G_L$ mit $L \in \mathbb{N}$ aus Lemma 5.5, bzw. $Z_h = G_{L,R}$ mit $L \in \mathbb{N}$ und $R > 0$ aus Lemma 5.10. Dann gilt für die Lösung $u_h \in Z_h$ der Gleichung*

$$\langle Tu_h, v_h \rangle = \langle f, v_h \rangle \quad \text{für alle } v_h \in Z_h$$

unter den oben gemachten Annahmen jeweils bis auf Konstanten die gleiche Fehlerabschätzungen für $\|u - u_h\|_m$ wie in Satz 5.6 bzw. Lemma 5.11 angegeben. Die Approximationsraten sind mit denen aus den Sätzen 5.8 bzw. 5.13 identisch.

Zur Bestimmung der Näherungslösung kann nun ein lineares Gleichungssystem für die Koeffizienten von u_h bezüglich einer Basis von Z_h aufgestellt werden. Dabei wird als Basis die natürliche Tensorproduktbasis auf den Dünngitterräumen des letzten Abschnittes gewählt.

Zur Vereinfachung der Notation werden im Sinne von (Brenner und Scott, 2008, Kapitel 7) Koordinatenabbildungen verwendet, was den Vorteil einer übersichtlicheren Darstellung besitzt. Seien zu diesem Zweck für $\ell \in \mathbb{N}$ Operatoren

$$(6.2) \quad I_\ell : \mathbb{R}^{\#V_\ell} \rightarrow V$$

durch Abbildung der Koordinaten bezüglich der Waveletbasis in V_ℓ in den Raum $V = H^m(\mathbb{R}^d)$ gegeben. In unserem Fall sind die Räume $\{V_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ bzw. $\{V_{\ell,R}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ aus Definition 5.4 bzw. 5.10 gegeben. Aus diesen Abbildungen konstruiere

$$(6.3) \quad I_{\vec{\ell}} = \bigotimes_{i=1}^N I_{\ell_i}, \quad \vec{\ell} \in \mathbb{N}^N.$$

Dadurch wird auf dem Raum $Z_{\vec{\ell}}$ als Basis das Tensorprodukt der Basen von $V_{\ell_1}, \dots, V_{\ell_N}$ gewählt.

Da Z_h die Vereinigung aller $Z_{\vec{\ell}}$ mit $|\vec{\ell}|_1 \leq L$ ist, kann eine Funktion $u_h \in Z_h$ somit durch die Koordinaten

$$x = [x_{\vec{\ell}}]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L} \in \mathbb{R}^{\#G_L}, \quad x_{\vec{\ell}} \in \mathbb{R}^{\#Z_{\vec{\ell}}}$$

dargestellt werden. Weiterhin gilt

$$(6.4) \quad u_h = \sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} I_{\vec{\ell}} x_{\vec{\ell}}.$$

Um das Gleichungssystem für die Koordinaten x der diskreten Lösung u_h zu formulieren wird der adjungierte Operator $I'_\ell : Z' \rightarrow \mathbb{R}^{\#Z_\ell}$ benötigt. Dieser ist kanonisch durch die Forderung

$$\langle I'_\ell f, x \rangle = \langle f, I_\ell x \rangle \quad \text{für alle } f \in Z', x \in \mathbb{R}^{\#Z_\ell}$$

gegeben, wobei hier $\langle \cdot, \cdot \rangle$ die entsprechenden dualen Paarungen bezeichne. Mit Hilfe dieser Operatoren kann der diskretisierte Operator $T : \mathbb{R}^{\#G_L} \rightarrow \mathbb{R}^{\#G_L}$ als

$$(6.5) \quad T = [T_{\ell, \bar{\ell}}]_{|\bar{\ell}|_1, |\ell|_1 \leq L}$$

geschrieben werden. Die Matrix besitzt also Blockstruktur, wobei jeder einzelne Block durch

$$(6.6) \quad T_{\ell, \bar{\ell}} : \mathbb{R}^{\#Z_{\bar{\ell}}} \rightarrow \mathbb{R}^{\#Z_\ell}, \quad T_{\ell, \bar{\ell}} = I'_\ell \mathbb{T} I_{\bar{\ell}}$$

gegeben ist.

Die rechte Seite des Gleichungssystems ist durch

$$b = [b_\ell]_{|\ell|_1 \leq L}, \quad b_\ell = I'_\ell f$$

bestimmt. Damit lautet nun das Gleichungssystem $Tx = b$. Die Galerkinlösung u_h , und damit eine Approximation an die Lösung u von Gleichung (6.1), ergibt sich nach Lösung dieses Gleichungssystems durch Gleichung (6.4).

2. Präkonditionierung und Iterationsverfahren

Zur effizienten Lösung des linearen Gleichungssystems $Tx = b$ können iterative Verfahren verwendet werden, wie zum Beispiel die Methode der konjugierten Gradienten. Durch die Normäquivalenz der Waveletkoeffizienten zu den Sobolevnormen können dabei einfache und effiziente Präkonditionierer konstruiert werden.

Die gewichteten Waveletkoeffizienten sind äquivalent zur Norm auf H^m , siehe Satz 4.4, und diese wiederum äquivalent zur von \mathbb{T} induzierten Energienorm. Damit folgt wegen der Transitivität auch die Normäquivalenz der gewichteten Waveletkoeffizienten zur Energienorm. Der durch

$$P : Z \rightarrow Z', \quad u \mapsto \sum_{\bar{\lambda} \in \nabla^N} 2^{2|\bar{\lambda}|} |\bar{\lambda}|_\infty^m \langle \tilde{\psi}_{\bar{\lambda}}, u \rangle_0 \langle \tilde{\psi}_{\bar{\lambda}}, \cdot \rangle_0$$

definierte Operator genügt somit der Normäquivalenz

$$\langle \mathbb{T}u, u \rangle \sim \langle Pu, u \rangle, \quad u \in Z.$$

Sei durch P die Diskretisierung von P bezüglich Z_h gegeben, das heißt

$$P = [P_{\ell, \bar{\ell}}]_{|\bar{\ell}|_1, |\ell|_1 \leq L}, \quad P_{\ell, \bar{\ell}} = I'_\ell P I_{\bar{\ell}}.$$

Auf Grund der speziellen Struktur von P ist P diagonal bezüglich der gewählten Basis. Da die Normäquivalenz sich ebenfalls auf jeden endlichen Teilraum von Z vererbt, gilt für die Matrizen

$$\langle Tx, x \rangle \sim \langle Px, x \rangle, \quad x \in \mathbb{R}^{\#Z_h}$$

unabhängig von Z_h , d.h. ebenfalls eine spektrale Äquivalenz.

Mit Hilfe von P kann ein einfacher und stufenunabhängiger Vorkonditionierer konstruiert werden. Transformiere dazu das Gleichungssystem $Tx = b$ mit Hilfe von

$$\tilde{T} = P^{-1/2} T P^{-1/2}, \quad \tilde{b} = P^{-1/2} b$$

in ein äquivalentes Gleichungssystem $\tilde{T}\tilde{x} = \tilde{b}$ für \tilde{x} . Die ursprüngliche Lösung x kann dabei durch $x = P^{-1/2}\tilde{x}$ berechnet werden. Das neue Gleichungssystem hat nach der obigen Diskussion eine Kondition, die unabhängig von der Stufe L beschränkt ist. Da P

zudem eine Diagonalmatrix ist, können die angegebene Transformation zudem einfach berechnet werden.

Aus diesem Grund konvergieren Iterationsverfahren wie zum Beispiel die Methode der konjugierten Gradienten angewandt auf dieses Gleichungssystem mit Raten, die unabhängig von der Stufe L beschränkt werden können. Für die effiziente Durchführung der Iterationsverfahren müssen jedoch auch die Anwendungen der Diskretisierungsmatrix auf einen Vektor schnell berechnet werden. Dies wird Thema des nächsten Kapitels sein.

3. Eigenwertprobleme

In diesem Abschnitt wird eine kurze Einführung in elliptische Eigenwertprobleme gegeben. Dabei beschränkt sich die Darstellung auf Konvergenzaussagen für den kleinsten Eigenwert. Weitere Theorie findet man dabei in den Darstellungen (Chatelin, 1983; Babuška und Osborn, 1989; Babuška und Osborn, 1991) und neuere Aussagen in (Knyazev und Osborn, 2006). Speziell im Kontext der Schrödingergleichung wird dies in (Yserentant, 2010a) behandelt. Bei der Galerkin-Diskretisierung erhält man im Unterschied zu Abschnitt 1 bei analogem Vorgehen ein verallgemeinertes Matrixeigenwertproblem anstatt eines linearen Gleichungssystems.

Zu dessen Lösung existiert eine Reihe von Verfahren, siehe zum Beispiel (Parlett, 1980). In dieser Arbeit wird jedoch ein präkonditioniertes indirektes Verfahren verwendet, das in (Neymeyr, 2001; Knyazev und Neymeyr, 2009) untersucht wird. Dieses Verfahren erlaubt dabei Konvergenzraten analog zur Lösung von linearen Gleichungssystemen. Für praktische Berechnungen scheint dabei das Verfahren BLOPEX, wie es in (Knyazev, 2001) vorgestellt wurde, das geeignetste zu sein.

Zur Formulierung des Eigenwertproblems sei neben dem Raum Z aus Abschnitt 1 noch ein Hilbertraum $(H, (\cdot, \cdot), |\cdot|)$ gegeben, so dass H stetig und dicht in Z eingebettet ist. Definiere weiterhin einen Operator

$$(6.7) \quad E : Z \rightarrow Z', \quad u \mapsto (u, \cdot),$$

wobei (\cdot, \cdot) das Skalarprodukt auf H bezeichne. Das Eigenwertproblem ist damit folgendermaßen gegeben: Gesucht sind Eigenpaare (λ, u) mit $u \in Z \setminus \{0\}$, so dass

$$\mathbb{T}u = \lambda Eu \quad \text{in } Z'$$

gilt. Der Operator erfülle dabei die gleichen Voraussetzungen wie in Abschnitt 1. In der Schreibweise über Bilinearformen ist dies äquivalent zu

$$a(u, v) = \lambda(u, v) \quad \text{für alle } v \in Z,$$

siehe dazu auch die Diskussion in (Rohwedder et al., 2010). Weiterhin wollen wir annehmen, dass λ_1 der kleinste Eigenwert ist. Dieser soll einfach und wohl getrennt vom Rest des Spektrums liegen, das durch $\Lambda > \lambda_1$ nach unten beschränkt sei.

In diesem Fall kann folgende Konvergenz des Galerkin-Verfahrens hergeleitet werden, zum Beweis siehe zum Beispiel (Yserentant, 2010a).

SATZ 6.2. *Sei u_1 mit $|u_1| = 1$ eine Eigenfunktion zum kleinsten Eigenwert λ_1 des Eigenwertproblems (6.7). Weiterhin sei $Z_h \subset Z$ ein endlichdimensionaler Unterraum und $(\lambda_{1,h}, u_{1,h})$ mit $u_{1,h} \in Z_h \setminus \{0\}$ ein Lösung zu*

$$(6.8) \quad \langle \mathbb{T}u_{1,h}, v_h \rangle = \lambda_{1,h}(u_{1,h}, v_h) \quad \text{für alle } v_h \in Z_h,$$

wobei $\lambda_{1,h}$ kleinstmöglich gewählt werde. Dann gilt unter den obigen Annahmen die Abschätzung

$$0 \leq \lambda_{1,h} - \lambda_1 \lesssim \inf_{u_h \in Z_h} \|u_1 - u_{1,h}\|^2$$

Der Wert $\lambda_{1,h}$ konvergiert somit quadratisch im Abstand von Z_h zum Eigenvektor u_1 .

In unserem Fall wollen wir annehmen, dass der Raum $H = L^2(\mathbb{R}^{dN})$ und $V = H^m(\mathbb{R}^{dN})$ für ein $m \geq 1$ gilt. Analog den Aussagen in Satz 6.1 können damit folgende Konvergenzaussagen hergeleitet werden.

KOROLLAR 6.3. *Setze $Z_h = G_L$ mit $L \in \mathbb{N}$ aus Lemma 5.5, bzw. $Z_h = G_{L,R}$ mit $L \in \mathbb{N}$ und $R > 0$ aus Lemma 5.10. Weiterhin liege die Eigenfunktion u_1 zum Eigenwert λ_1 im Raum $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$, wobei $m + s < \tau$ und $\gamma > 0$ gelte. Hierbei ist τ die Schranke der Normäquivalenz der Waveletbasis. Dann gilt für die Lösung $\lambda_{1,h}$ der Gleichung (6.8) unter den obigen Annahmen die Fehlerabschätzung*

$$0 \leq \lambda_{1,h} - \lambda_1 \lesssim C_\gamma^{n_\xi} \gamma^{-2dN} 2^{-2L} \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}^2$$

im ersten Fall, bzw.

$$0 \leq \lambda_{1,h} - \lambda_1 \lesssim C_\gamma^{n_\xi} \gamma^{-2dN} \max\{e^{-\gamma R}, 2^{-2L}\} \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}^2$$

im zweiten Fall. Die Konstanten sind dabei unabhängig von L , γ und R .

Um die approximative Lösung $(\lambda_{1,h}, u_{1,h})$ zu bestimmen muss ein verallgemeinertes Eigenwertproblem für die dazugehörigen Koordinaten von $u_{h,1}$ gelöst werden. Analog zur Diskretisierung von T , siehe Gleichungen (6.5) und (6.6), erhält man für den Operator E die Matrix

$$E = [E_{\bar{\ell}, \bar{\ell}'}]_{|\bar{\ell}|_1, |\bar{\ell}'|_1 \leq L}, \quad E_{\bar{\ell}, \bar{\ell}'} = I_{\bar{\ell}}^L E I_{\bar{\ell}'},$$

so dass die Bestimmungsgleichung durch

$$Tx = \lambda_h Ex$$

gegeben ist. Gesucht ist dabei der kleinste Eigenwert $\lambda_{1,h}$ und der dazugehörige Eigenvektor $x_{1,h}$.

Zur Lösung kann neben klassischen Verfahren (Parlett, 1980) auch die präkonditionierte inverse Iteration verwendet werden. Diese Iteration wurde erstmals in (Samokish, 1958) und (Godunov et al., 1976) untersucht. Neuere Ansätze zur Konvergenzuntersuchung sind dabei in (Knyazev und Neymeyr, 2009) gegeben. Im Falle von Operatorgleichungen wurde die Konvergenz darauf aufbauend in (Rohwedder et al., 2010) hergeleitet. Analog zu den Verfahren für lineare Systeme in Abschnitt 2 wird der dort definierte Präkonditionierer, nach geeigneter Skalierung, verwendet.

Für einen gegebenen Vektor $x \in \mathbb{R}^{\#Z_h}$ wird mit Hilfe der Vorschrift

$$(6.9) \quad x' = x + \alpha P^{-1}(Tx - \mu(x)Ex), \quad \mu(x) = \frac{\langle Tx, x \rangle}{\langle Ex, x \rangle}$$

der Nachfolger x' generiert, wobei $\mu(x)$ der Rayleighquotient von x ist. Die Skalierung α wird so gewählt, dass

$$(1 - \beta) \langle Tx, x \rangle \leq \langle \alpha P x, x \rangle \leq (1 + \beta) \langle Tx, x \rangle, \quad x \in \mathbb{R}^{\#Z_h}$$

für ein möglichst kleines β gilt. Für die so entstehende normierte Folge $(x_k)_{k=0,1,\dots}$ und den entsprechenden Rayleighquotienten $(\mu_k)_{k=0,1,\dots}$ kann folgende Konvergenz gezeigt werden, siehe auch (Knyazev und Neymeyr, 2009; Rohwedder et al., 2010).

SATZ 6.4. *In der Notation von Gleichung (6.9) gelte für den Rayleighquotienten μ_0 des Startwerts x_0 $\mu_0 < \lambda_{2,h}$, wobei $\lambda_{2,h}$ den zweitgrößte diskreten Eigenwert bezeichne. Dann gilt für die Folge der Rayleighquotienten μ_0, μ_1, \dots die Abschätzung*

$$\mu_k - \lambda_{1,h} \lesssim q \cdot (\mu_{k-1} - \lambda_{1,h}), \quad q < 1$$

für alle $k = 1, 2, \dots$. Hierbei ist q von der Qualität des Präkonditionierers β sowie vom Ausdruck $(\lambda_{1,h} - \lambda_{2,h})/\lambda_{1,h}$ abhängig. Insbesondere konvergiert die Folge $(\mu_k)_{k \in \mathbb{N}}$ der Rayleighquotienten linear gegen den kleinsten Eigenwert $\lambda_{1,h}$.

Bisher wurde hier nur die Konvergenz des Rayleighquotienten betrachtet. Weiterhin existieren auch Aussagen über die Konvergenz der Eigenvektoren. Für genauere Abschätzungen siehe zum Beispiel (Knyazev und Osborn, 2006) oder (Yserentant, 2010a).

Algorithmen auf dünnen Gittern

Im letzten Kapitel wurde für elliptische Probleme das Gleichungssystem zur Bestimmung der Näherungslösung aufgestellt und gezeigt, dass durch diagonales Skalieren ein effizienter und einfacher Präkonditionierer gegeben ist. Verwendet man geeignete iterative Verfahren so sind die Konvergenzraten stufenunabhängig. Zur effizienten Realisierung iterativer Verfahren wird jedoch zusätzlich eine schnelle Routine benötigt, die die Anwendung der Steifigkeits- bzw. Massesmatrix auf einen Vektor berechnet.

Verwendet man wie im letzten Kapitel dünne Gitter bezüglich einer anisotropen Waveletbasis für die Diskretisierung, so stellt man fest, dass die Diskretisierungsmatrizen selbst für lokale Operatoren im wesentlichen voll besetzt sind. Eine direkte Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts ist somit ineffizient und das Nadelöhr bei iterativen Verfahren.

Jedoch können in speziellen Fällen effiziente Routinen entworfen werden, die die *Anwendung* der Diskretisierungsmatrix auf einen Vektor effizient, d.h. linear in der Größe des Vektors, berechnen können. Solch ein Verfahren wurde erstmals für ein klassisches dünnes Gitter aufbauend auf der eindimensionalen hierarchischen Basis angegeben (Balder und Zenger, 1996; Bungartz, 1992; Bungartz, 1998). Kern dabei ist ein Algorithmus, der die Tensorproduktstruktur des zugrunde liegenden Operators ausnutzt und dadurch nur linear in der Anzahl der Unbekannten skaliert. Für allgemeinere Dünngitterräume, wie zum Beispiel Multilevel Frames Finiter Elemente (Harbrecht et al., 2008) kann ein suboptimaler Algorithmus angegeben werden, der auf den Überlegungen von Schwab und Todor beruht (Schwab und Todor, 2003).

Der zentrale Punkt dieses Kapitels ist nun, aufbauend auf den oben genannten Algorithmen, einen linear skalierenden Algorithmus auf verallgemeinerte Dünngitterräume zu konstruieren. Grundlage der Untersuchung ist dabei eine abstrakte Formulierung auf beliebigen verallgemeinerten Dünngitterräumen, wobei die in Kapitel 5 definierten Ansatzräume von Lemma 5.5 und 5.10 als Spezialfall angesehen werden können. Auf diese Art treten zudem die zugrunde liegenden Mechanismen deutlicher hervor.

Dazu wird im ersten Abschnitt aufgezeigt, wie höherdimensionale dünne Gitter rekursiv aus niederdimensionalen aufgebaut werden können. Mit Hilfe dieser Technik kann man sich für die weiteren Aussagen auf den Fall eines zweidimensionalen dünnen Gitters beschränken. Im Abschnitt 2 wird die Struktur der Diskretisierungsmatrix bestimmt. Anschließend wird in Abschnitt 3 ein Algorithmus angegeben, der die vorhandene blockweise Tensorproduktstruktur ausnutzt. Das Unidirektionale Prinzip wird anschließend im Abschnitt 4 vorgestellt. Im vorliegenden Fall kann zusätzlich noch die Mehrskalenstruktur der Ansatzfunktionen verwendet werden, siehe Abschnitt 5. Durch die abstrakte Formulierung kann die Komplexität der einzelnen Algorithmen jedoch nicht explizit angegeben werden. Um eine quantitative Analyse zu erhalten wird in Abschnitt 6 das dünne Gitter auf einem beschränkten Gebiet als Modellfall betrachtet. Dabei werden alle angegebenen Algorithmen quantitativ untersucht und mit dem Aufwand beim direkten Aufstellen der Matrix verglichen. Im letzten Abschnitt werden die Algorithmen in einem numerischen Experiment verglichen.

1. Reduktion der Dimensionen

Ein Schlüssel zur Behandlung hochdimensionaler dünner Gitter ist die Tatsache, dass sie eine rekursive Struktur besitzen. Dadurch vereinfacht sich die Formulierung von Algorithmen, da man sich auf den zweidimensionalen Fall beschränken kann. Grundlegend ist dabei die einfache Beobachtung

$$|\vec{\ell}|_1 = \ell_1 + |(\ell_2, \dots, \ell_N)|_1.$$

Damit können für $\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N$ die Dünngitterräume höherer Dimension rekursiv konstruiert werden: Ein Dünngitterraum der Dimension N ist somit eine abgeschnittene Summe von Tensorprodukträumen V_{ℓ_1} mit den Dünngitterräumen der Stufe $|\vec{\ell}|_1 - \ell_1$ des $(N - 1)$ -dimensionalen Dünngitterraumes. Dadurch können die Aussagen für hochdimensionale Dünngitterräume über Induktion bewiesen werden. Das folgende Lemma präzisiert die Aussage.

LEMMA 7.1. *Sei G_L ein N -dimensionaler Dünngitterraum aufbauend auf den Räumen $\{V_\ell^{(1)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}, \dots, \{V_\ell^{(N)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$. Definiere für $\ell \in \mathbb{N}$ die Hilfsräume*

$$\tilde{V}_\ell := \sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^{N-1} \\ |\vec{\ell}|_1 = \ell}} \bigotimes_{i=2}^N V_{\ell_{i-1}}^{(i)},$$

das heißt die Summe aller $(N - 1)$ -dimensionalen Tensorprodukträume mit Stufe ℓ . Dann stimmt G_L mit dem zweidimensionalen Dünngitterraum bezüglich der Räume $\{V_\ell^{(1)}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ und $\{\tilde{V}_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ zur selben Stufe überein.

BEWEIS. Der Beweis folgt direkt aus der Definition 5.3 und der Tatsache, dass

$$\sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^2 \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} V_{\ell_1}^{(1)} \otimes \tilde{V}_{\ell_2} = \sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^2 \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} V_{\ell_1}^{(1)} \otimes \left[\sum_{\substack{\vec{\ell}' \in \mathbb{N}^{n-1} \\ |\vec{\ell}'|_1 = \ell_2}} \bigotimes_{\alpha=2}^n V_{\ell'_{\alpha-1}}^{(\alpha)} \right] = \sum_{\substack{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^n \\ |\vec{\ell}|_1 \leq L}} \bigotimes_{\alpha=1}^n V_{\ell_\alpha}^{(\alpha)},$$

gilt, da $|\vec{\ell}|_1 = \ell_1 + |\vec{\ell}'|_1$. □

Aus diesem Grund beschränkt sich im Weiteren die Behandlung der Dünngitterräume auf den zweidimensionalen Fall, das heißt $N = 2$. Weiterhin nehmen wir aus Gründen der Notation an, dass sowohl die Räume $V_\ell^{(1)}$ und $V_\ell^{(2)}$ als auch die Teilräume $(V_\ell^{(1)})_{\ell=0,1,\dots}$ und $(V_\ell^{(2)})_{\ell=0,1,\dots}$ identisch sind. Somit gilt im Folgenden

$$G_L := \sum_{|\vec{\ell}|_1 \leq L} V_{\ell_1} \otimes V_{\ell_2}.$$

Für die auftretenden Indizes $\vec{\ell}$ wird angenommen, dass sie Element von \mathbb{N}^2 sind.

Die Aussagen dieses Kapitels können jedoch auf den Fall verallgemeinert werden, bei dem die Unterräume nicht übereinstimmen. Insbesondere kann daher der zweite Raum analog zu Lemma 7.1 selbst ein Dünngitterraum sein. Auf diesem Wege können die Aussagen somit auch auf den höherdimensionalen Fall verallgemeinert werden. An den entsprechenden Stellen werden Hinweise gegeben, wie dies durchgeführt werden kann.

2. Tensorproduktoperatoren

Die in diesem Kapitel vorgestellten Algorithmen sind nicht für allgemeine Operatoren gültig, sondern nur für solche Operatoren, die selbst eine Tensorproduktstruktur bezüglich

der Faktoren des Dünngitterraumes besitzen. Wir beschränken uns auf Operatoren der Form

$$(7.1) \quad T = S \otimes S, \quad S : V \rightarrow V',$$

das heißt T zerfällt in ein Tensorprodukt zweier Operatoren. Dabei kann allgemeiner auch $T = S^{(1)} \otimes S^{(2)}$ gesetzt werden, aber aus Gründen der Einfachheit verzichten wir auf den Fall. Die Verallgemeinerung in diesem Sinne bereitet jedoch keine Probleme.

Diese Einschränkung schließt dabei eine große Klasse von Operatoren aus. Jedoch gilt zum Beispiel für den N -Dimensionalen Laplaceoperator

$$\Delta = \Delta \otimes \text{Id} \otimes \dots \otimes \text{Id} + \dots + \text{Id} \otimes \text{Id} \otimes \dots \otimes \Delta,$$

wobei in dem Tensorprodukt der eindimensionale Laplaceoperator als Faktor auftritt. Somit kann dieser Operator als Summe von Operatoren der Form (7.1) dargestellt werden. Andere Operatoren können zumindest näherungsweise als Summe von Tensorproduktoperatoren dargestellt werden, so dass die Überlegungen dieses Kapitels auch in diesem Fall verwendet werden können.

Zur Diskretisierung des Operators T kann man nun analog zu Kapitel 6, Abschnitt 1 vorgehen. Zusätzlich kann jedoch die Tensorproduktstruktur von T ausgenutzt werden, so dass die einzelnen Blöcke durch

$$(7.2) \quad \begin{aligned} T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} &= (I_{\ell_1} \otimes I_{\ell_2})'(S \otimes S)(I_{\ell_1'} \otimes I_{\ell_2'}) \\ &= (I_{\ell_1}' S I_{\ell_1}) \otimes (I_{\ell_2}' S I_{\ell_2}) \\ &= S_{\ell_1, \ell_1'} \otimes S_{\ell_2, \ell_2'}. \end{aligned}$$

gegeben sind. Das heißt, die Blöcke besitzen bezüglich dieser speziellen Basis Tensorproduktstruktur. Im Gegensatz zur Diskretisierung auf vollen Gittern kann die gesamte Matrix T jedoch nicht als Tensorprodukt geschrieben werden.

Das Vorgehen kann dabei leicht auf höhere Dimensionen, unterschiedliche Operatoren $S^{(i)}$ und unterschiedliche Unterräume $V^{(i)}$ verallgemeinert werden. Die diskretisierten Operatoren haben dann die Form

$$T = [T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'}]_{|\vec{\ell}|_1, |\vec{\ell}'|_1 \leq L} \quad \text{mit} \quad T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} = \bigotimes_{i=1}^N S_{\ell_i}^{(i)},$$

wobei hier $\vec{\ell}, \vec{\ell}' \in \mathbb{N}^N$ gilt.

Für iterative Löser muss nun ein Algorithmus angegeben werden, der die Anwendung der Matrix auf einen Vektor berechnet: bestimme für $x = [x_{\vec{\ell}}]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L} \in \mathbb{R}^{\#G_L}$

$$y = Tx, \quad \text{mit} \quad [y_{\vec{\ell}}]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L} = \left[\sum_{|\vec{\ell}'|_1 \leq L} T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} x_{\vec{\ell}'} \right]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L}.$$

Eine direkte Berechnung dieses Matrix-Vektor-Produkts ist jedoch nicht effizient, da die Matrix T sogar für lokale Operatoren annähernd voll besetzt, siehe dazu auch Abschnitt 6 dieses Kapitels. Daher darf bei der Berechnung von $y = Tx$ die Matrix nicht explizit aufgestellt werden, sondern es muss die spezielle Tensorproduktstruktur des Operators T ausgenutzt werden.

3. Algorithmus von Schwab und Todor

In diesem Abschnitt wird der Algorithmus zur Berechnung der Matrix-Vektor-Multiplikation, wie er in (Schwab und Todor, 2003) gegeben ist, vorgestellt. Der Schlüssel ist dabei die Beobachtung, dass die Diskretisierungsmatrix eine blockweise Tensorproduktstruktur besitzt: die einzelnen Blöcke $T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'}$ in Gleichung (7.2) erben die Tensorproduktstruktur des

Operators T . Diese Tatsache kann bei einer Matrix-Vektor-Multiplikation ausgenutzt werden, wenn die Anwendung blockweise geschieht. Die Berechnung kann dabei in unterschiedlicher Reihenfolge geschehen:

$$\begin{aligned} (S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) x_{\vec{\ell}} &= (\text{Id}_{\ell_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) [(S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell'_2}) x_{\vec{\ell}}] \\ &= (S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell'_2}) [(\text{Id}_{\ell'_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) x_{\vec{\ell}}], \end{aligned}$$

wobei Id_ℓ die Identität auf dem Koordinatenraum von V_ℓ bezeichne. Wie in (Schwab und Todor, 2003) beschrieben wählt man für den Algorithmus nun die Reihenfolge, die mit weniger Aufwand berechnet werden kann. Der Algorithmus ist somit folgendermaßen gegeben.

ALGORITHMUS 7.2. (SCHWABTODOR)

Eingabe: $x = [x_{\vec{\ell}}]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L}$, $[S_{\ell, \ell'}]_{\ell, \ell' \leq L}$

Ausgabe: $y = Tx$, $y = [y_{\vec{\ell}}]_{|\vec{\ell}|_1 \leq L}$

for all $|\vec{\ell}|_1 \leq L$

for all $|\vec{\ell}'|_1 \leq L$

$$y_{\vec{\ell}} := y_{\vec{\ell}} + \begin{cases} (\text{Id}_{\ell_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) [(S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell'_2}) x_{\vec{\ell}}] \\ (S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell'_2}) [(\text{Id}_{\ell'_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) x_{\vec{\ell}}] \end{cases} \quad \text{mit minimalem Aufwand.}$$

endfor

endfor

Die Reihenfolge, in der die Operatoren angewendet werden, ist hier entscheidend. Als Beispiel sei der zweidimensionale Dünngitterraum G_2 gegeben. Setze $\vec{\ell} = (2, 0)$ und $\vec{\ell}' = (0, 2)$. Wählt man für die Berechnung die erste Zeile, so muss als Zwischenergebnis der Anwendung von $S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell'_2}$ ein Koordinatenvektor für ein Element in $V_2 \otimes V_2$ gespeichert werden. Im Gegensatz dazu benötigt die Auswertung der zweiten Zeile zur Zwischenspeicherung ein Element des Raums $V_0 \otimes V_0$, der im Allgemeinen weniger Freiheitsgrade als $V_2 \otimes V_2$ besitzt.

4. Unidirektionaler Algorithmus

Der Algorithmus SCHWABTODOR benutzt die Tensorproduktstruktur innerhalb der Blöcke, um die Berechnung des Matrix-Vektor-Produktes zu beschleunigen. Zusätzlich besitzt die Matrix T als Gesamtes eine tensorproduktartige Struktur, die jedoch nicht so offensichtlich wie im Falle der Vollgitterdiskretisierung ist. Diese Struktur kann jedoch benutzt werden um den Algorithmus zu verbessern. Diese Tatsache wurde als erstes in (Balder und Zenger, 1996; Bungartz, 1992) zur Konstruktion von Algorithmen für Dünngitterräume basierend auf der eindimensionalen hierarchischen Basis verwendet.

Um einen Einblick zu erhalten, wie diese Struktur ausgenutzt werden kann, betrachte vorerst die Diskretisierung auf einem vollen Gitter mit Multiindizes $|\vec{\ell}|_\infty \leq L$. Auch mit dieser Diskretisierung kann der Algorithmus SCHWABTODOR mit offensichtlichen Änderungen ausgeführt werden. Nutzt man jedoch die Tensorproduktstruktur der vollen Matrix aus, kann ebenfalls für jedes $\vec{\ell}$

$$y_{\vec{\ell}} = \sum_{|\vec{\ell}'|_\infty \leq L} (S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) x_{\ell'} = \sum_{\ell'_1=0}^L (S_{\ell_1, \ell'_1} \otimes \text{Id}_{\ell_2}) \left[\underbrace{\sum_{\ell'_2=0}^L (\text{Id}_{\ell'_1} \otimes S_{\ell_2, \ell'_2}) x_{\ell'}}_{=: z_{(\ell'_1, \ell_2)}} \right]$$

berechnet werden. Die zweite Summe kann dabei im Voraus berechnet und in der Variable $z_{(\ell'_1, \ell_2)}$ zwischengespeichert werden. Dadurch zerfällt die Doppelsumme in zwei Einzelsummen. Die Berechnungen finden dabei jeweils in eine Koordinatenrichtung statt, ein Prinzip das *unidirektional* genannt wird.

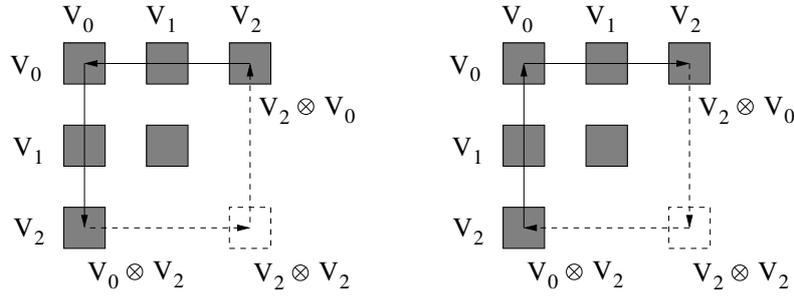


ABBILDUNG 1. Skizze des unidirektionalen Prinzips für verschiedene Reihenfolge der Anwendung. In Abhängigkeit von der Reihenfolge und der betroffenen Unterräume können die Zwischenergebnisse selbst auf dem dünnen Gitter gespeichert werden (durchgezogene Pfeile) oder nicht (gepunktete Pfeile).

Dieses Prinzip kann jedoch nicht ohne weiteres auf die Diskretisierung mit dünnen Gittern übertragen werden, da die erforderlichen Zwischenergebnisse wiederum auf vollen Gittern gespeichert werden müssten und damit die Vorzüge der Dünngitterdiskretisierung verloren gehen. Um dies zu sehen sei wie in der Analyse des Algorithmus SCHWABTODOR ein zweidimensionales dünnes Gitter mit $L = 2$ gegeben, siehe dazu Bild 1. Im linken Bild wird als erstes S bezüglich der Horizontalen angewendet. In diesem Fall benötigt man den Unterraum $V_2 \otimes V_2$ um das Zwischenergebnis für den Effekt von $V_0 \otimes V_2$ auf $V_2 \otimes V_0$ zu speichern. Vertauscht man die Rollen der Unterräume, so reicht $V_0 \otimes V_0$ zum Speichern des Zwischenergebnisses. Vertauscht man nun die Reihenfolge der Anwendung, das heißt führt man zuerst die Operationen vertikal aus, so wechseln die Rollen der Unterräume.

Als Konsequenz folgt somit, dass beide Reihenfolgen benötigt werden um die Zwischenergebnisse effizient speichern zu können. Man muss jedoch beachten, dass Beiträge nicht mehrfach gezählt werden. Analog zum Algorithmus in (Balder und Zenger, 1996; Bungartz, 1992) spalten wir die Summe

$$y_{\vec{\ell}} = \sum_{|\vec{\ell}'|_1 \leq L} T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} x_{\vec{\ell}'}$$

hinsichtlich $\vec{\ell}$ in zwei Teile auf, wobei die Reihenfolge der Summation für $\vec{\ell}'$ im zweiten Teil vertauscht wird:

$$\sum_{|\vec{\ell}'|_1 \leq L} = \sum_{\substack{|\vec{\ell}'|_1 \leq L \\ 0 \leq \ell'_1 \leq \ell_1}} + \sum_{\substack{|\vec{\ell}'|_1 \leq L \\ \ell_1 + 1 \leq \ell'_1 \leq L}} = \sum_{\ell'_1=0}^{\ell_1} \sum_{\ell'_2=0}^{L-\ell'_1} + \sum_{\ell'_2=0}^{L-\ell_1} \sum_{\ell'_1=\ell_2+1}^{L-\ell'_2}.$$

Nun kann man wie im Falle eines vollen Gitters vorgehen, das heißt die Tensorproduktstruktur entkoppelt die Doppelsumme. Als Zwischenergebnis erhalten wir

$$\tilde{z}_{\vec{\ell}} = \sum_{\ell=0}^{L-\ell_1} (\text{Id}_{\ell_1} \otimes S_{\ell_2, \ell}) x_{\ell_1, \ell}, \quad \hat{z}_{\vec{\ell}} = \sum_{\ell=\ell_1+1}^{L-\ell_2} (S_{\ell_1, \ell} \otimes \text{Id}_{\ell_2}) x_{\ell, \ell_2},$$

für alle $\vec{\ell}$ des Dünngitterraumes. Die Werte $\tilde{z}_{\vec{\ell}}$ und $\hat{z}_{\vec{\ell}}$ benutzt man anschließend zur Berechnung von

$$\tilde{y}_{\vec{\ell}} = \sum_{\ell=0}^{\ell_1} (S_{\ell_1, \ell} \otimes \text{Id}_{\ell_2}) \tilde{z}_{\ell, \ell_2}, \quad \hat{y}_{\vec{\ell}} = \sum_{\ell=0}^{L-\ell_1} (\text{Id}_{\ell_1} \otimes S_{\ell_2, \ell}) \hat{z}_{\ell_1, \ell}.$$

Als Ergebnis setzt man letztendlich $y_{\vec{\ell}} = \tilde{y}_{\vec{\ell}} + \hat{y}_{\vec{\ell}}$. Durch direktes Nachrechnen kann man leicht zeigen, dass durch $y_{\vec{\ell}}$ tatsächlich das Ergebnis von Tx gegeben ist.

Der vorgestellte Algorithmus benutzt wie im Falle eines vollen Gitters die Anwendung der Operatoren auf Schnitten entlang einer Koordinatenrichtung. Im Folgenden soll daher eine Notation entwickelt werden, die diese Strategie noch deutlicher hervorhebt.

Gegeben sei ein Koordinatenvektor $x = [x_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$ eines Elementes in $V_0 + \dots + V_L$. Zerlege eine Matrix $S = [S_{\ell,\ell'}]_{\ell,\ell' \leq L}$ in

$$S_{\nabla} x := \left[\sum_{\ell'=0}^{\ell} S_{\ell,\ell'} x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L}, \quad S_{\Delta} x := \left[\sum_{\ell'=\ell+1}^L S_{\ell,\ell'} x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L},$$

das heißt in die untere und strikte obere Blockmatrix S_{∇} und S_{Δ} von S . Es gilt $S = S_{\nabla} + S_{\Delta}$.

Auf dem Dünngitterraum sei durch

$$x_{\bullet,\ell_2} = [x_{\ell,\ell_2}]_{\ell=0,\dots,L-\ell_2}, \quad x_{\ell_1,\bullet} = [x_{\ell_1,\ell}]_{\ell=0,\dots,L-\ell_1}.$$

ein Schnitt entlang den Koordinatenachsen definiert. In dieser Notation gilt nun

$$\hat{z}_{\bullet,\ell_2} = \left[\sum_{\ell'=\ell+1}^{L-\ell_2} (S_{\ell,\ell'} \otimes \text{Id}_{\ell_2}) x_{\ell',\ell_2} \right]_{\ell=0,\dots,L-\ell_2} = (S_{\Delta} \otimes \text{Id}_{\ell_2}) x_{\bullet,\ell_2}.$$

Damit kann der Vektor \hat{z}_{\bullet,ℓ_2} , das heißt der Schnitt von \hat{z} entlang der ersten Dimension, durch die Anwendung der strikten oberen Dreiecksmatrix S_{Δ} auf den Schnitt x_{\bullet,ℓ_2} berechnet werden. Um \hat{z} vollständig zu berechnen muss dies für jeden möglichen Schnitt, d.h. für alle zulässigen Indizes ℓ_2 bezüglich der zweiten Dimension, durchgeführt werden. Analoge Aussagen gelten auch für die anderen Ausdrücke.

Der neue Algorithmus kann nun mit Hilfe dieser Notation folgendermaßen geschrieben werden.

ALGORITHMUS 7.3. (UNIDIR)

<p>Eingabe: $x = [x_{\vec{\ell}}]_{ \vec{\ell} _1 \leq L}$</p> <p>Ausgabe: $y = Tx$, mit $y = [y_{\vec{\ell}}]_{ \vec{\ell} _1 \leq L}$</p>	<p>for all $\ell \leq L$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\hat{y}_{\ell,\bullet} := (\text{Id}_{\ell} \otimes S) \hat{z}_{\ell,\bullet}$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\tilde{z}_{\ell,\bullet} := (\text{Id}_{\ell} \otimes S) x_{\ell,\bullet}$</p> <p>endfor</p> <p>for all $\ell \leq L$</p> <p style="padding-left: 20px;">$\tilde{y}_{\bullet,\ell} := (S_{\nabla} \otimes \text{Id}_{\ell}) \tilde{z}_{\bullet,\ell}$</p> <p>endfor</p> <p>$y = \hat{y} + \tilde{y}$.</p>
--	---

Der Algorithmus berechnet somit nacheinander die Anwendung der Operatoren auf den Schnitten in der ersten Koordinatenrichtung $x_{\bullet,\ell}$ und in der zweiten Koordinatenrichtung $x_{\ell,\bullet}$. Der letzte noch fehlende Teil ist ein Algorithmus zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produktes mit $S_{\nabla/\Delta}$. Alle weiteren Terme $S = S_{\nabla} + S_{\Delta}$ und $(S_{\nabla/\Delta} \otimes \text{Id}_{\ell}) x_{\bullet,\ell}$ können damit berechnet werden.

im Folgenden konzentrieren wir daher auf die Berechnung der Ausdrücke

$$S_{\nabla} x = \left[\sum_{\ell'=0}^{\ell} S_{\ell,\ell'} x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L}, \quad S_{\Delta} x = \left[\sum_{\ell'=\ell+1}^L S_{\ell,\ell'} x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L}.$$

Die erste Möglichkeit ist die direkte Berechnung.

ALGORITHMUS 7.4. (TOPDOWNSIMPLE, BOTTOMUPSIMPLE)

TOPDOWNSIMPLE

Eingabe: $x = [x_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$,
 $[S_{\ell,\ell'}]_{\ell,\ell' \leq L}$
 Ausgabe: $y = [y_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$,
 $y = S_{\nabla}x$

for all $\ell = 0, \dots, L$
for all $\ell' = 0, \dots, \ell$
 $y_\ell := y_\ell + S_{\ell,\ell'}x_{\ell'}$
endfor
endfor

BOTTOMUPSIMPLE

Eingabe: $x = [x_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$,
 $[S_{\ell,\ell'}]_{\ell,\ell' \leq L}$
 Ausgabe: $y = [y_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$,
 $y = S_{\Delta}x$

for all $\ell = 0, \dots, L$
for all $\ell' = \ell + 1, \dots, L$
 $y_\ell := y_\ell + S_{\ell,\ell'}x_{\ell'}$
endfor
endfor

Dabei stammen die Namen TOPDOWN und BOTTOMUP aus der Arbeit von Bungartz (Bungartz, 1998). Sie stammen aus der Art die entsprechenden Ausdrücke durch einen entsprechenden Durchlauf durch einen Baum zu berechnen.

Mit Hilfe dieser Routinen kann nun der Algorithmus UNIDIR vervollständigt werden.

ALGORITHMUS 7.5. Der aus der Kombination der Algorithmen UNIDIR, Algorithmus 7.3, und TOPDOWNSIMPLE und BOTTOMUPSIMPLE, Algorithmus 7.4, entstehende Algorithmus werde mit UNIDIRSIMPLE bezeichnet.

Verglichen mit dem Algorithmus 7.2 SCHWABTODOR, vermeidet der obige Algorithmus die mehrfache Berechnung von bestimmten Summen. Die Reduktion einer vierfach geschachtelten Schleife auf eine dreifach geschachtelte Schleife deutet an, dass dieser Algorithmus effizienter ist.

5. Mehrskalen Algorithmus

Im letzten Abschnitt wurde die geschachtelte Summation durch Einführung von Zwischengrößen entkoppelt und so die Effizienz des Algorithmus verbessert. In diesem Abschnitt konzentrieren wir uns auf den Algorithmus zur Berechnung von $S_{\Delta/\nabla}x$. Dabei werden wir die zweite Idee des Algorithmus UNIDIR aus (Balder und Zenger, 1996; Bungartz, 1992; Bungartz, 1998) verallgemeinern, die auf einer gewissen Mehrskalenstruktur in den eindimensionalen Räumen $\{V_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ beruht.

In der Folge werden effiziente Algorithmen zur Berechnung der Ausdrücke

$$S_{\nabla}x = \left[\sum_{\ell'=0}^{\ell} S_{\ell,\ell'}x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L}, \quad \text{und} \quad S_{\Delta}x = \left[\sum_{\ell'=\ell+1}^L S_{\ell,\ell'}x_{\ell'} \right]_{\ell=0,\dots,L},$$

untersucht. Eine Verbesserung der Algorithmen TOPDOWNSIMPLE bzw. BOTTOMUPSIMPLE wird im Allgemeinen nur möglich sein, wenn die Blockmatrizen $S_{\ell,\ell'}$ eine gewisse Struktur besitzen. Wir werden im Folgenden annehmen, dass die Ansatzräume eine Mehrskalenstruktur besitzen. Das Ziel ist nun, Berechnungen auf einer größeren Stufe $\ell-1$ für die Stufe ℓ wiederzuverwenden und umgekehrt. Für geschachtelte Räume kann dies mit Interpolation auf die feinere Stufe geschehen, siehe zum Beispiel (Yserentant, 1986).

Diese Technik werden wir auch im vorliegenden Fall benutzen. Wir nehmen an, dass eine Folge geschachtelter Räume $\hat{V}_0 \subset \hat{V}_1 \subset \dots$ existiert, so dass $V_\ell \subset \hat{V}_\ell$ für alle $\ell = 0, 1, \dots$ gilt. Auf Grund dieser Struktur gilt demnach

$$V_0 + V_1 + \dots + V_\ell \subset \hat{V}_\ell,$$

d.h. der Raum \hat{V}_ℓ umfasst die Räume aller größeren Stufen. Im Falle der hierarchischen Basis stellt \hat{V}_ℓ dabei die volle Hütchenbasis auf der Stufe ℓ dar. Sind die Räume $(V_\ell)_{\ell=0,1,\dots}$

durch eine Mehrskalenganalyse gegeben, so wird \hat{V}_ℓ als die Menge aller Skalierungsfunktionen der Stufe ℓ gewählt. In beiden Fällen sieht man, dass die Funktionen aller größeren Stufen bezüglich dieses Raumes dargestellt werden können.

Sei nun durch

$$E_\ell : V_\ell \rightarrow \hat{V}_\ell, \quad v_\ell \mapsto v_\ell$$

die kanonische Einbettung der Räume V_ℓ in \hat{V}_ℓ gegeben. Weiterhin seien die wiederum durch die kanonische Einbettung Prolongationsoperatoren durch

$$P_\ell : \hat{V}_\ell \rightarrow \hat{V}_{\ell+1}, \quad \hat{v}_\ell \mapsto \hat{v}_\ell$$

gegeben. Die Diskretisierungsmatrizen werden von E_ℓ und P_ℓ werden mit E_ℓ , bzw. P_ℓ bezeichnet. Weiterhin bezeichne $\hat{S}_{\ell,\ell}$ die Diskretisierungsmatrix bezüglich der Räume \hat{V}_ℓ . Zusätzlich werden ebenfalls die transponierten Matrizen E_ℓ^* und P_ℓ^* benötigt. Definiere folgenden Algorithmus:

ALGORITHMUS 7.6. (TOPDOWNML/BOTTOMUPML)

TOPDOWNML	BOTTOMUPML
<p>Eingabe: $x = [x_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$ $[\hat{S}_{\ell,\ell}]_{\ell=0,1,\dots,L}$, $[E_\ell]_{\ell=0,1,\dots,L}$, $[P_\ell]_{\ell=0,1,\dots,L}$</p> <p>Ausgabe: $y = [y_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$, $y = S_{\nabla}x$</p> <p>$\hat{x}_0 := E_0x_0$ $y_0 := E_0^*\hat{S}_{0,0}\hat{x}_0$ for $\ell = 1, \dots, L$ $\hat{x}_\ell := P_{\ell-1}\hat{x}_{\ell-1} + E_\ell x_\ell$ $y_\ell = E_\ell^*\hat{S}_{\ell,\ell}\hat{x}_\ell$. endfor</p>	<p>Eingabe: $x = [x_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$ $[\hat{S}_{\ell,\ell}]_{\ell=0,1,\dots,L}$, $[E_\ell]_{\ell=0,1,\dots,L}$, $[P_\ell]_{\ell=0,1,\dots,L}$</p> <p>Ausgabe: $y = [y_\ell]_{\ell=0,\dots,L}$, $y = S_{\Delta}x$</p> <p>$\hat{y}_L := \hat{S}_L E_L x_L$ $y_L := 0$ for $\ell = L-1, L-2, \dots, 0$ $y_\ell = E_\ell^* P_\ell^* \hat{y}_{\ell+1}$ $\hat{y}_\ell = P_\ell^* \hat{y}_{\ell+1} + \hat{S}_{\ell,\ell} E_\ell x_\ell$ endfor</p>

Für die Analyse von TOPDOWNML sei angemerkt, dass in \hat{x}_ℓ alle Beiträge der Funktion auf der rechten Seite bis einschließlich der Stufe ℓ enthalten sind. Bei der Berechnung von $\hat{S}_{\ell,\ell}\hat{x}_\ell$ und der anschließenden Restriktion auf den Raum V_ℓ werden somit alle Beiträge der größeren Stufen und der Stufe ℓ berücksichtigt. Die Summation geschieht dabei von den größeren zu den feineren Stufen.

Im Gegensatz dazu verläuft die Summation zur Berechnung von $S_{\Delta}x$ im Algorithmus BOTTOMUPML in entgegengesetzter Richtung, von den feineren Stufen zu den größeren. Dabei wird die Mehrskalenstruktur im Ergebnis \hat{y}_ℓ ausgenutzt. In \hat{y}_ℓ sind alle Beiträge von der feinsten bis zur Stufe $\ell-1$ berücksichtigt. Der Algorithmus kann bis auf die Diagonaleinträge als adjungierte Matrix betrachtet werden, siehe auch (Balder, 1994).

Diese beiden Algorithmen können nun als Kern im Algorithmus UNIDIR verwendet werden.

ALGORITHMUS 7.7. Der aus der Kombination der Algorithmen UNIDIR, Algorithmus 7.3, und TOPDOWNML und BOTTOMUPML, Algorithmus 7.6, entstehende Algorithmus werde mit UNIDIRML bezeichnet.

Im Vergleich mit dem Algorithmus SCHWABTODOR, Algorithmus 7.2, und UNIDIRSIMPLE, Algorithmus 7.5, benötigt Algorithmus UNIDIRML nur eine zweifach verschachtelte Schleife, im Gegensatz zu einer drei- bzw. vierfach verschachtelten Schleife. Eine weitere Schleife ist dabei in den Räumen \hat{V}_ℓ versteckt, da man im Allgemeinen immer

$$\hat{V}_\ell = V_0 + \dots + V_\ell$$

setzen kann. Um die Berechnung tatsächlich zu beschleunigen müssen die Räume eine Mehrskalenstruktur besitzen.

6. Modellfall

In diesem Abschnitt wird die Komplexität der Algorithmen der letzten Abschnitte anhand des dünnen Gitters auf einem beschränkten Gebiet untersucht und mit der direkten Berechnung verglichen. Dabei werden die Räume aus Definition 5.9 betrachtet. Für einen festen Radius $R > 0$ bestehen somit die Räume V_ℓ aus isotropen Wavelets in d Variablen. Die Mächtigkeit von V_ℓ ist nach Lemma 5.12 und dem Beweis dabei asymptotisch in ℓ und R durch

$$\#V_\ell \lesssim R^d 2^{d\ell}$$

gegeben und der zweidimensionale Dünngitterraum aufbauend auf den eben definierten Räume V_ℓ besitzt asymptotisch die Dimension

$$(7.3) \quad \#G_L \lesssim R^{2d} L 2^{dL}.$$

in L und R .

Um die Komplexität der direkten Berechnung des Matrix-Vektor-Produktes anzugeben, werden im Folgenden die Anzahl der Einträge in der Diskretisierungsmatrix bestimmt. Dazu nehmen wir an, dass der Operator T lokal wirkt: für zwei Funktionen u, v mit disjunktem Träger sei auch der entsprechende Eintrag $\langle Tu, v \rangle$ der Diskretisierungsmatrix Null. Um die Anzahl der Matrixeinträge zu bestimmen, muss also die Anzahl der Paare von Basisfunktionen berechnet werden, deren Träger einen nichtleeren Schnitt besitzen.

Als Basis dient das Tensorprodukt der Ansatzfunktionen aus Gleichung (6.3). Die Träger zweier Basisfunktionen $\psi_{\vec{\chi}}$ und $\psi_{\vec{\chi}'}$ haben genau dann nichtleeren Schnitt, wenn die Träger der einzelnen Faktoren jeweils nichtleeren Schnitt besitzen.

Diese Tensorproduktstruktur werden wir im Folgenden ausnutzen. Sei durch $M_{\ell, \ell'}$ die Massematrix bezüglich $L^2(\mathbb{R}^d)$ für die Unterräume V_ℓ und $V_{\ell'}$ bezeichnet. Aus der Mehrskalenstruktur der isotropen Waveletbasis kann die Anzahl der Einträge durch

$$\#M_{\ell, \ell'} = R^d 2^{d \max(\ell, \ell')}$$

abgeschätzt werden. Hierbei wurde keine mögliche Orthogonalität berücksichtigt.

Um die Einträge in T abzuschätzen definiere die Hilfsgröße

$$E(\ell, \ell') = \sum_{|\vec{\ell}|_1 = \ell, |\vec{\ell}'|_1 = \ell'} \#T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'},$$

das heißt die Anzahl der Einträge in dem Teil der Matrix T , für welche die zugehörigen Räume die Stufe ℓ bzw. ℓ' besitzen. Auf Grund der Tensorproduktstruktur gilt für jeden Block $T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'}$

$$\#T_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} \lesssim \#M_{\ell_1, \ell'_1} \cdot \#M_{\ell_2, \ell'_2} \sim R^{2d} 2^{d \max(\ell_1, \ell'_1)} \cdot 2^{d \max(\ell_2, \ell'_2)}$$

nach den obigen Überlegungen.

Die Summe in $E(\ell, \ell')$ kann als

$$\begin{aligned} E(\ell, \ell') &= \sum_{j=0}^{\ell} \sum_{j'=0}^{\ell'} \#T_{(j, \ell-j), (j', \ell'-j')} \\ &\sim \sum_{j=0}^{\ell} \sum_{j'=0}^{\ell'} R^{2d} 2^{d \max(j, j')} \cdot 2^{d \max(\ell-j, \ell'-j')} \end{aligned}$$

geschrieben werden. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann $\ell' \geq \ell$ angenommen werden, wodurch die obige Summe in

$$E(\ell, \ell') \sim R^{2d} \sum_{j=0}^{\ell} \left[\sum_{j'=0}^{j-1} 2^{dj} \cdot 2^{d(\ell'-j')} + \sum_{j'=j}^{\ell'-\ell+j-1} 2^{dj'} \cdot 2^{d(\ell'-j')} + \sum_{j'=\ell'-\ell+j}^{\ell'} 2^{dj'} \cdot 2^{d(\ell-j)} \right],$$

aufgeteilt werden kann. Eine direkte Rechnung ergibt

$$E(\ell, \ell') \sim R^{2d} 2^{d(\ell+\ell')}$$

asymptotisch in ℓ , ℓ' und letztendlich

$$(7.4) \quad \#T = \sum_{\ell, \ell'=0}^L E(\ell, \ell') \sim R^{2d} \sum_{\ell, \ell'=0}^L 2^{d(\ell+\ell')} \sim R^{2d} 2^{2dL}$$

asymptotisch in L und R .

Eine vollbesetzte Matrix besitzt nach Gleichung (7.3) asymptotisch $R^{4d} L^2 2^{2dL}$ Einträge. Somit ist die berechnete Anzahl der Einträge, $R^{2d} 2^{2dL}$, bis auf den Faktor $R^{-2d} L^2$ ist dies das Quadrat der Mächtigkeit $R^{2d} L 2^{dL}$ des Dünnitterraumes G_L . In der Stufe L des Dünnitterraumes ist somit die Matrix bis auf logarithmische Terme voll besetzt. Dadurch skaliert die Komplexität einer direkten Matrix-Vektor-Multiplikation annähernd quadratisch in der Zahl der Unbekannten.

Als nächstes wird der Algorithmus SCHWAB TODOR für das Modellproblem diskutiert. Die Ausführungen lehnen sich dabei an die Arbeit (Harbrecht et al., 2008) an. Als Abschätzung für den Aufwand bei der Berechnung der ersten Zeile in Algorithmus 7.2 erhält man

$$(7.5) \quad \#V_{\ell_1} \cdot \#S_{\ell_2, \ell'_2} + \#S_{\ell_1, \ell'_1} \cdot \#V_{\ell'_2} \sim R^{2d} 2^{d\ell_1} \cdot 2^{d \max(\ell_2, \ell'_2)} + R^{2d} 2^{d \max(\ell_1, \ell'_1)} \cdot 2^{d\ell'_2}.$$

Damit kann der Aufwand durch $R^{2d} 2^{d \max(\ell_1 + \ell'_2, |\ell|, |\ell'|)}$ und für die zweite Zeile analog durch $R^{2d} 2^{d \max(\ell_2 + \ell'_1, |\ell|, |\ell'|)}$ abgeschätzt werden. Somit wird man die erste Zeile wählen, falls $\ell_1 + \ell'_2 \leq \ell'_1 + \ell_2$ gilt sonst die zweite.

Es gelte nun $\ell_1 + \ell'_2 \leq \ell'_1 + \ell_2$, das heißt zur Berechnung wird die erste Zeile gewählt. Dann kann der Aufwand nach Gleichung (7.5) durch $R^{2d} 2^{d \max(|\vec{\ell}|_1, |\vec{\ell}'|_1)}$ abgeschätzt werden. Um das zu sehen unterscheiden wir zwei Fälle: Falls $\ell'_2 \leq \ell_2$ gilt, dann folgt offensichtlich $\ell_1 + \ell'_2 \leq \ell_1 + \ell_2 = |\vec{\ell}|_1$. Gilt andererseits $\ell'_2 > \ell_2$ so folgt aus der Annahme $\ell_1 + \ell'_2 \leq \ell'_1 + \ell_2$ dass

$$\ell_1 + \ell'_2 \leq \ell'_1 + \ell_2 \leq \ell'_1 + \ell'_2 = |\vec{\ell}'|_1$$

gilt und somit $\ell_1 + \ell'_2 \leq \max(|\vec{\ell}|_1, |\vec{\ell}'|_1)$. Wählt man wegen $\ell_1 + \ell'_2 > \ell'_1 + \ell_2$ die zweite Zeile so ergibt sich analog dieselbe Abschätzung.

Aus den obigen Überlegungen folgt, dass zur Berechnung höchstens

$$\sum_{|\vec{\ell}|_1, |\vec{\ell}'|_1 \leq L} R^{2d} 2^{d \max(|\vec{\ell}|_1, |\vec{\ell}'|_1)} \sim R^{2d} \sum_{\ell, \ell'=0}^L \ell \ell' 2^{d \max(\ell, \ell')} \sim R^{2d} L^3 2^{dL}$$

Operationen notwendig sind.

Verglichen mit der Anzahl der Rechenoperationen $R^{2d} 2^{2dL}$ aus Gleichung (7.4), die ein explizites Aufstellen der Matrix benötigt, zeigt sich hier eine große Verbesserung der Komplexität um den Faktor 2^{dL} (bis auf logarithmische Terme). Jedoch ist der Aufwand noch nicht linear in der Anzahl der Unbekannten $R^{2d} L 2^{dL}$ aus Gleichung (7.3).

Nun wird für den Algorithmus UNIDIRSIMPLE die Komplexität für den Modellfall abgeschätzt. Wir beginnen dabei mit dem Algorithmus TOPDOWNSIMPLE. Der Aufwand kann dabei durch

$$\mathcal{W}_S(L) \sim \sum_{\ell=0}^L \sum_{\ell'=0}^{\ell} R^d 2^{d \max(\ell, \ell')} \sim R^d L 2^{dL},$$

abgeschätzt werden. Eine analoge Aussage gilt auch für den Algorithmus BOTTONUPSIMPLE. Damit folgt für den Algorithmus UNIDIRSIMPLE direkt, dass die Anzahl der Rechenoperationen durch

$$\mathcal{W}_{US}(L) \sim \sum_{\ell=0}^L \mathcal{W}_S(L - \ell) \cdot \#V_{\ell} \sim \sum_{\ell=0}^L R^d (L - \ell) 2^{d(L-\ell)} R^d 2^{d\ell} \sim R^{2d} L^2 2^{dL},$$

beschränkt werden kann. Verglichen mit dem Algorithmus SCHWABTODOR gewinnt man somit einen logarithmischen Faktor L , wenn das unidirektionale Prinzip angewandt wird. Jedoch ist der Aufwand noch nicht linear in der Anzahl der Unbekannten $R^{2d} L 2^{dL}$.

Als letztes wird der Algorithmus UNIDIRML untersucht. Dazu müssen die Hilfsräume konstruiert werden, die im Modellfall direkt angegeben werden können: \hat{V}_{ℓ} ist dabei die Menge der Skalierungsfunktionen zur Stufe $\ell + 1$. Aus der Verfeinerungsgleichung und der Verschachtelung der Räume können damit alle Beiträge in V_0, \dots, V_{ℓ} dargestellt werden. Die Mächtigkeit ist dabei asymptotisch durch $\#\hat{V}_{\ell} \sim R^d 2^{d\ell}$ und somit identisch mit der von V_{ℓ} gegeben. Weiterhin gilt für die Diskretisierung und die Einbettungsoperatoren

$$\#\hat{S}_{\ell, \ell} \sim R^d 2^{d\ell}, \quad \#E_{\ell} \sim R^d 2^{d\ell}, \quad P_{\ell} \sim R^d 2^{d\ell}$$

aus der Mehrskalenstruktur.

Dadurch kann der Aufwand der Algorithmen TOPDOWNML, Algorithmus 7.4 durch

$$\mathcal{W}_{ML}(L) \sim \sum_{\ell=0}^L \#P_{\ell-1} + \#E_{\ell} + \#\hat{S}_{\ell, \ell} \sim R^d 2^{dL},$$

abgeschätzt werden. Eine analoge Aussage gilt auch für den Algorithmus BOTTONUPML. Damit folgt für den Algorithmus UNIDIRML direkt, dass die Anzahl der Rechenoperationen durch

$$\mathcal{W}_{UML}(L) \sim \sum_{\ell=0}^L \mathcal{W}_{ML}(L - \ell) \cdot \#V_{\ell} \sim \sum_{\ell=0}^L R^d 2^{d(L-\ell)} R^d 2^{d\ell} \sim R^{2d} L 2^{dL}.$$

beschränkt werden kann. Verglichen mit dem Algorithmus UNIDIRSIMPLE gewinnt durch das Ausnutzen der Mehrskalenstruktur somit wiederum einen logarithmischen Faktor L . Der Aufwand ist damit linear in der Anzahl der Unbekannten $R^d L 2^{dL}$ und somit optimal.

7. Numerisches Beispiel

In diesem Abschnitt werden anhand eines numerischen Beispiels die drei Algorithmen SCHWABTODOR, UNIDIRSIMPLE und UNIDIRML verglichen. Sei dazu wie in (Harbrecht et al., 2008) der Fall $V = H_0^1[0, 1]$ und $S = -\Delta$ gegeben, also

$$\mathbb{T} = \frac{\partial^4}{\partial x^2 \partial y^2} \quad \text{auf} \quad Z = H_0^1[0, 1] \otimes H_0^1[0, 1].$$

Als Ansatzräume $\{V_{\ell}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ soll der eindimensionale Mehrskalenframe aufbauend auf der stückweise linearen Hutfunktion benutzt werden. Die V_{ℓ} werden demnach durch

$$\phi_{\ell, k}(x) = 2^{-\ell/2} \phi(2^{\ell+1}x - k), \quad \text{for} \quad k = 1, 2, \dots, 2^{\ell+1} - 1,$$

aufgespannt, wobei $\phi(x) = \max(1 - |x|, 0)$ die Hutfunktion auf $[-1, 1]$ ist. Die Diskretisierung ist somit redundant und wir können $\hat{V}_{\ell} = V_{\ell}$ wählen, so dass $E_{\ell} = \text{Id}$ gilt.

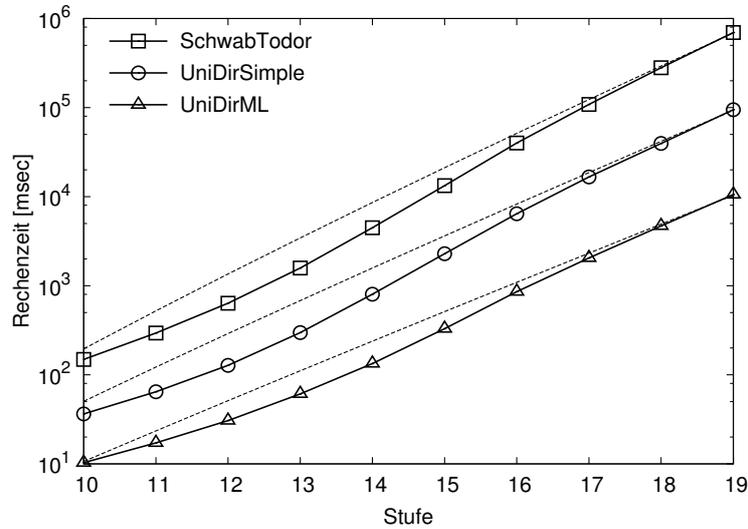


ABBILDUNG 2. Vergleich der Rechenzeiten für eine Matrix-Vektor-Multiplikation in Abhängigkeit von der Stufe des dünnen Gitters für die vorgestellten Algorithmen. Die gestrichelten Linien geben dabei die asymptotischen Raten an.

Die Diskretisierungsmatrizen $\hat{S}_{\ell,\ell}$ ist durch die übliche Steifigkeitsmatrix gegeben und die Prolongationen sind die Interpolationsoperatoren.

Damit gilt auch für diese Diskretisierung dasselbe asymptotische Verhalten wie für den Modellfall des letzten Abschnittes. Die numerischen Ergebnisse können somit mit den theoretischen Vorhersagen verglichen werden.

Die drei Algorithmen wurden angelehnt an (Harbrecht et al., 2008) dazu in MATLAB implementiert. Das numerische Experimente zeigt, dass vom ersten Level $L = 1$ an UNIDIRML der schnellste Algorithmus ist, gefolgt von UNIDIRSIMPLE als zweit schnellsten und SCHWABTODOR als langsamsten. Bild 2 zeigt dabei für die Stufen $L = 10, \dots, 19$ die Zeiten für eine Matrix-Vektor-Multiplikation an. Bei Stufe $L = 19$ sind die Algorithmen UNIDIRSIMPLE und UNIDIRML sechs bzw. sechzig mal schneller als SCHWABTODOR. Weiterhin sind auch die asymptotischen Raten eingezeichnet, wie sie für den Modellfall berechnet wurden. Dabei zeigt sich, dass sich die asymptotischen Raten etwa für Stufe $L = 16$ einstellen.

Teil 2

Die elektronische Schrödingergleichung

Die Schrödingergleichung

Dieses Kapitel gibt eine kurze Einführung in das aus der Schrödingergleichung für Atome und Moleküle resultierende Eigenwertproblem. Speziell wird auf die Antisymmetrie und deren Konsequenzen eingegangen.

Die physikalische Interpretation wird dabei nur am Rande behandelt. Hierfür sei auf grundlegende Einführungen in die Quantenmechanik wie zum Beispiel (Cohen-Tannoudji et al., 1977; Messiah, 1963; Thaller, 2000; Thaller, 2004) verwiesen. In (Gustafson und Sigal, 2003) wird die mathematische Seite der Quantenmechanik detailliert behandelt.

Im ersten Abschnitt wird das Eigenwertproblem formuliert und die passenden Räume festgelegt. Eine entscheidende Rolle spielt hier die Antisymmetriebedingung, die in Abschnitt 2 genauer betrachtet wird. Im letzten Abschnitt werden diese Resultate verwendet, um invariante Unterräume zu konstruieren und so das Eigenwertproblem zu vereinfachen.

1. Der Hamiltonoperator

Leichte Atome und daraus aufgebaute Moleküle werden durch das Modell der nichtrelativistischen Quantenmechanik sehr genau beschrieben. Insbesondere können alle physikalischen Eigenschaften, wie zum Beispiel Spektren und Bindungsenergien, daraus abgeleitet werden. Der Zustand eines quantenmechanischen Systems zu einem Zeitpunkt t ist eindeutig durch eine Wellenfunktion festgelegt. Interessant für die Chemie sind hier vor allem stationäre Zustände, die im Weiteren untersucht werden sollen.

Auf Grund des großen Masseunterschieds zwischen den Elektronen und den Kernen genügt es, nur die Elektronen quantenmechanisch zu beschreiben. Die Positionen und die Ladungen der Kerne gehen dabei parametrisch in die Gleichung für die Wellenfunktion ein. Diese sogenannte Born-Oppenheimer-Näherung (Born und Oppenheimer, 1927) liefert im Allgemeinen ausreichend genaue Ergebnisse.

Damit wird die quantenmechanische Beschreibung von Atomen und Molekülen auf eine zeitunabhängige Wellenfunktion für N Elektronen reduziert. Jedes einzelne Elektron besitzt neben seiner Ortsvariable $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$ dabei einen Spin $\sigma \in \{\pm 1/2\}$. Die Wellenfunktion ist eine Abbildung

$$(8.1) \quad \psi : (\mathbb{R}^3)^N \times \{\pm 1/2\}^N \rightarrow \mathbb{C}, \quad (\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma}) \mapsto \psi(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma}),$$

mit

$$\vec{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) \in (\mathbb{R}^3)^N, \quad \vec{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in \{\pm 1/2\}^N,$$

wobei \mathbf{x}_i und σ_i die Orts- bzw. die Spinvariable des i -ten Elektrons sind.

Wegen der Ununterscheidbarkeit der Teilchen muss die Wellenfunktion bestimmten Symmetriebedingungen genügen. Genauer, es muss nach dem Pauli-Prinzip für Fermionen

$$(8.2) \quad \psi(P\vec{\mathbf{x}}, P\vec{\sigma}) = \text{sign}(P)\psi(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma})$$

für alle Permutationen $P \in S_N$ der symmetrischen Gruppe gelten. Nur Wellenfunktionen, die diese Bedingung erfüllen, beschreiben einen physikalischen Zustand eines elektronischen Systems.

Schließlich muss die Wellenfunktion ψ eines Atoms oder Moleküls der Eigenwertgleichung

$$(8.3) \quad H\psi = E\psi, \quad \psi \neq 0$$

genügen, wobei $E \in \mathbb{R}$ die Energie des elektronischen Systems ist. In den Hamiltonoperator H geht dabei die spezielle Zusammensetzung des betrachteten Systems ein. Seien dafür M Kerne an den Position $\mathbf{a}_\nu \in \mathbb{R}^3$ jeweils mit Ladung Z_ν für $\nu = 1, \dots, M$ gegeben. Der nichtrelativistische Hamiltonoperator lautet dann

$$(8.4) \quad H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \Delta_i - \sum_{i=1}^N \sum_{\nu=1}^M \frac{Z_\nu}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{a}_\nu|} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \frac{1}{|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|},$$

wobei Δ_i der Laplaceoperator bezüglich der Koordinaten \mathbf{x}_i ist. Hier und im Folgenden werden dimensionslose atomare Einheiten verwendet. Relativistische Effekte, wie z.B. die Spin-Bahn-Kopplung werden in diesem Modell nicht berücksichtigt. Dies führt dazu, dass die Wellenfunktion aus Gleichung (8.1) ohne Einschränkung als Abbildung nach \mathbb{R} anstatt nach \mathbb{C} gesehen werden kann.

Entscheidend ist nun, in welchen Funktionenräumen die Wellenfunktion ψ gesucht wird. John von Neumann legte in seiner Monographie (von Neumann, 1932) die mathematischen Grundlagen der Quantenmechanik, die auf der Theorie der unbeschränkten selbstadjungierten Operatoren beruht. Speziell für die elektronische Schrödingergleichung konnte Kato (Kato, 1951a) zeigen, dass für eine geeignete und natürliche Wahl des zugrunde liegenden Raums der Hamiltonoperator tatsächlich selbstadjungiert ist. Eine ausführliche Behandlung dieses Themas findet sich zum Beispiel in den Lehrbüchern (Weidmann, 2000; Hislop und Sigal, 1996).

Ausgangspunkt für die Wahl der geeigneten Räume ist die Deutung des Betragsquadrats $|\psi(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma})|^2$ als Wahrscheinlichkeitsverteilung. Daraus folgt die Normierungsbedingung

$$(8.5) \quad \sum_{\vec{\sigma} \in \{\pm 1/2\}^N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} |\psi(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma})|^2 d\vec{\mathbf{x}} = 1.$$

Jedoch muss die Menge der Funktionen weiter eingeschränkt werden um den Laplaceoperator zu definieren. Grundlage dafür sind ungewichtete Sobolevräume, das heißt der Spezialfall $w = 1$ von Definition 3.1. Die dort eingeführten Sobolevräume können direkt auf Wellenfunktionen erweitert werden, die zusätzlich zu den Ortsvariablen noch die diskrete Variable des Spins haben.

DEFINITION 8.1. Sei $m \in \mathbb{N}$ und $N \geq 1$ die Anzahl der Teilchen. Der *Sobolevraum* $\mathcal{H}^m(N)$ der Ordnung m für N Teilchen ist definiert als die Menge aller Abbildungen

$$\psi : \mathbb{R}^{3N} \times \{\pm 1/2\}^N \rightarrow \mathbb{R},$$

so dass $\psi(\cdot, \vec{\sigma}) \in H^m(\mathbb{R}^{3N})$ für jede Komponenten $\vec{\sigma} \in \{\pm 1/2\}^N$ gilt. Weiterhin seien die Funktionen antisymmetrisch, das heißt es gelte

$$\psi(P\vec{\mathbf{x}}, P\vec{\sigma}) = \text{sign}(P)\psi(\vec{\mathbf{x}}, \vec{\sigma})$$

für alle Permutationen $P \in S_N$. Durch

$$(8.6) \quad \langle \psi, \varphi \rangle_m = \sum_{\vec{\sigma} \in \{\pm 1/2\}^N} \langle \psi(\cdot, \vec{\sigma}), \varphi(\cdot, \vec{\sigma}) \rangle_m$$

ist ein Skalarprodukt auf $\mathcal{H}^m(N)$ gegeben. Die entsprechende Norm wird ebenfalls mit $\|\cdot\|_m$ bezeichnet. Für den Spezialfall $m = 0$ schreibt man auch $\mathcal{L}^2(N)$.

Die Arbeit (Kato, 1951b) behandelt die Schrödingergleichung ohne Betrachtung des Spins. Durch die Tatsache, dass der Spin im Hamiltonoperator nicht vorkommt, können die Ergebnisse aber leicht auf den Fall mit Spin verallgemeinert werden. Aus diesen Überlegungen folgt, dass der Hamiltonoperator ein unbeschränkter, selbstadjungierter Operator

$$H : \mathcal{H}^2 \subset \mathcal{L}^2 \rightarrow \mathcal{L}^2$$

ist.

Somit kann der Hamiltonoperator mit den Mitteln für unbeschränkte selbstadjungierte Operatoren untersucht werden. Insbesondere können Eigenschaften des Spektrums dieses Operators angegeben werden, das auch im physikalischen Sinne das Spektrum eines Atoms oder Moleküls wiedergibt.

2. Antisymmetrie

Bevor im folgenden Abschnitt genauer auf das Eigenwertproblem eingegangen wird, wird in diesem Abschnitt die Antisymmetrie genauer betrachtet. Speziell wird eine antisymmetrische Funktion bezüglich der z -Komponente des Gesamtspins zerlegt. Die einzelnen Summanden sind dabei durch ein antisymmetrisiertes Produkt einer Ortsfunktion und einer Spinfunktion gegeben.

DEFINITION 8.2. Der *Antisymmetrisierungsoperator* A angewandt auf einer Funktion u in N Variablen sei durch

$$(8.7) \quad (Au)(\vec{r}) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \text{sign}(P) u(P\vec{r})$$

definiert, wobei S_N die symmetrische Gruppe bezeichne.

Man kann nun leicht nachprüfen, dass A ein Projektor auf den Raum der antisymmetrischen Funktionen ist. Zum einen gilt $Au = u$ für eine antisymmetrische Funktion u und zum anderen ist Au für eine beliebige Funktion u antisymmetrisch.

In unserem Fall setzen sich die Komponenten r_i von $\vec{r} = (r_1, \dots, r_N)$ aus der Ortsvariablen \mathbf{x}_i und der Spinvariablen σ_i zusammen, d.h. es gilt $r_i = (\mathbf{x}_i, \sigma_i)$. In diesem Fall ist A sogar bezüglich jeder Sobolevnorm ein orthogonaler Projektor auf den Raum der antisymmetrischen Funktionen, wie in Kapitel 10, Abschnitt 1 gezeigt wird.

im Folgenden wird untersucht, welche Eigenschaften antisymmetrische Funktionen besitzen. Zur Veranschaulichung sei eine bivariate, antisymmetrische Funktion u auf dem Raum \mathbb{R}^2 gegeben. Dann genügt es, die Funktion auf dem Bereich $\{(x, y) \in \mathbb{R}^d \mid x < y\}$ zu kennen. Denn für den Fall $y > x$ gilt automatisch $u(x, y) = -u(y, x)$. Eine ähnliche Eigenschaft besitzt auch eine antisymmetrische Wellenfunktion ψ : diese ist schon dann eindeutig festgelegt, wenn für bestimmte Spinkonfigurationen $\vec{\sigma}$ die Komponenten $\psi(\cdot, \vec{\sigma})$ bekannt sind. Um diese Spinkonfigurationen weiter zu untersuchen, werden die Spins in Äquivalenzklassen unterteilt.

LEMMA 8.3. Sei $N \geq 1$. Auf dem Raum aller Spins $\{\pm 1/2\}^N$ heißen zwei Spinkonfigurationen $\vec{\sigma}, \vec{\eta}$ äquivalent, in Zeichen $\vec{\sigma} \sim \vec{\eta}$, falls eine Permutation $P \in S_N$ existiert, so dass $P\vec{\sigma} = \vec{\eta}$ gilt. Dadurch ist eine Äquivalenzrelation gegeben. Weiterhin sind durch Spinkonfigurationen der Art

$$(8.8) \quad \vec{\sigma} = \underbrace{(+1/2, \dots, +1/2)}_{N_+ \text{ mal}}, \underbrace{(-1/2, \dots, -1/2)}_{N_- \text{ mal}}, \quad N_+ = 0, \dots, N$$

ein System von Repräsentanten gegeben, die mit \mathcal{R}_N bezeichnet seien.

Die Aussagen des Lemmas können direkt gezeigt werden. Für eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ beschreibt N_+ die Anzahl der Elektronen mit Spin $+1/2$ und entsprechend $N_- = N - N_+$ mit Spin $-1/2$. Wie folgendes Lemma zeigt, ist eine antisymmetrische Funktion eindeutig durch die Komponenten $\psi(\cdot, \vec{\sigma})$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$, festgelegt.

LEMMA 8.4. *Sei ψ eine antisymmetrische Funktion und seien zwei äquivalente Spinkonfigurationen $\vec{\sigma} \sim \vec{\eta}$ gegeben, so dass $\vec{\eta} = P\vec{\sigma}$ für eine Permutation P gilt. Dann folgt*

$$\psi(\vec{x}, \vec{\eta}) = \text{sign}(P)\psi(P^{-1}\vec{x}, \vec{\sigma}),$$

das heißt beide Komponenten $\psi(\cdot, \vec{\eta})$ und $\psi(\cdot, \vec{\sigma})$ der Funktion ψ unterscheiden sich nur im Vorzeichen und einer Permutation der Variablen.

BEWEIS. Es gilt

$$\psi(\vec{x}, \vec{\eta}) = \psi(PP^{-1}\vec{x}, P\vec{\sigma}) = \text{sign}(P)\psi(P^{-1}\vec{x}, \vec{\sigma})$$

wegen der Antisymmetrie von ψ . \square

im Folgenden wird eine antisymmetrische Funktion in eine Summe von Funktionen zerlegt, wobei jeder Summand ein antisymmetrisiertes Produkt zweier Funktionen ist. Der erste Faktor ist dabei eine Funktion in den Ortsvariablen und der zweite eine elementare Funktion der Spinvariablen $\vec{\sigma}$. Wie im nächsten Abschnitt gezeigt wird, liegen die einzelnen Summanden bezüglich des Hamiltonoperators in invarianten Unterräumen. Auf diese Weise entkoppelt das Eigenwertproblem der Wellenfunktion ψ und man erhält für jeden Summanden ein separates Eigenwertproblem. Das Vorgehen kann als Analogon einer Separation der Variablen für antisymmetrische Funktionen gesehen werden.

In der folgenden Definition werden, allgemeiner als in der Schrödingergleichung benötigt, Funktionen behandelt, deren Variablen in N d -Tupel aufgeteilt sind. Speziell für Wellenfunktionen wird hierbei $d = 3$ gesetzt.

DEFINITION 8.5. Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Definiere nun die Räume

$$H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN}) := \{u \in H^m(\mathbb{R}^{dN}) \mid u(P\vec{x}) = \text{sign}(P)u(\vec{x}), \text{ für alle } P \in S_N : P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}\}$$

der bezüglich $\vec{\sigma}$ partiell antisymmetrischen Funktionen m -ter Ordnung.

Folgendes Korollar zeigt, dass durch eben diese Funktionenklassen die einzelnen Komponenten einer antisymmetrischen Funktion beschrieben werden.

KOROLLAR 8.6. Sei $N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $\psi \in \mathcal{H}^m(N)$ eine antisymmetrische Funktion. Setze für alle Repräsentanten $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$

$$(8.9) \quad u_{\vec{\sigma}} = \frac{N!}{N_+! N_-!} \psi(\cdot, \vec{\sigma}).$$

Dann gilt $u_{\vec{\sigma}} \in H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$ und die Funktion ψ kann mittels

$$(8.10) \quad \psi = \sum_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} A(u_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}})$$

dargestellt werden, wobei δ das Kronecker-Delta bezeichne, d.h. $\delta_{\vec{\sigma}}(\vec{\eta}) = 1$ für $\vec{\eta} = \vec{\sigma}$ und Null sonst.

BEWEIS. Für die erste Behauptung berechnet man für eine Permutation $P \in S_N$ mit $P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}$

$$u_{\vec{\sigma}}(P\vec{x}) = \frac{N!}{N_+! N_-!} \psi(P\vec{x}, \vec{\sigma}) = \frac{N!}{N_+! N_-!} \psi(P\vec{x}, P\vec{\sigma}).$$

Durch die Antisymmetrie von ψ erhält man so $\text{sign}(P)u_{\vec{\sigma}}(\vec{x})$.

Zum Beweis der zweiten Behauptung sei $\vec{\eta} \in \mathcal{R}_N$ ein Repräsentant. Nach Definition des Antisymmetrisierungsoperators A gilt

$$\left[\sum_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} A(u_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}}) \right] (\vec{x}, \vec{\eta}) = \frac{1}{N!} \sum_{P \in S_N} \sum_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} \text{sign}(P) u_{\vec{\sigma}}(P\vec{x}) \delta_{\vec{\sigma}}(P\vec{\eta}).$$

Bei der Summe über $\vec{\sigma}$ braucht jedoch nur $\vec{\sigma} = \vec{\eta}$ berücksichtigt werden, da beide Spinkonfigurationen Repräsentanten sind und somit für alle anderen $\delta_{\vec{\sigma}}(P\vec{\eta}) = 0$ gilt. Weiterhin tragen nur solche Permutationen zur Summe bei, für die $P\vec{\eta} = \vec{\eta}$ gilt. Somit folgt

$$\left[\sum_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} A(u_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}}) \right] (\vec{x}, \vec{\eta}) = \frac{1}{N!} \sum_{P: P\vec{\eta}=\vec{\eta}} \text{sign}(P) u_{\vec{\eta}}(P\vec{x}).$$

Nach der eben bewiesenen Aussage gilt aber $u_{\vec{\eta}}(P\vec{x}) = \text{sign}(P) u_{\vec{\eta}}(\vec{x})$ für die auftretenden $N_+! N_-!$ Permutationen. Damit gilt

$$\left[\sum_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} A(u_{\vec{\sigma}} \cdot \delta_{\vec{\sigma}}) \right] (\vec{x}, \vec{\eta}) = \frac{N_+! N_-!}{N!} u_{\vec{\eta}}(\vec{x}) = \psi(\vec{x}, \vec{\eta})$$

nach Definition der Komponente $u_{\vec{\eta}}$. Somit stimmen beide Seiten für alle Repräsentanten $\vec{\eta} \in \mathcal{R}_N$ überein. Da beide Funktionen antisymmetrisch sind, sind sie nach Lemma 8.4 identisch. \square

3. Eigenwertprobleme

Aufbauend auf der Zerlegung der antisymmetrischen Funktionen in Gleichung (8.10) kann in diesem Abschnitt das Eigenwertproblem vereinfacht werden. Es wird sich zeigen, dass die einzelnen Summanden Elemente bezüglich des Hamiltonoperators H invarianter Unterräume sind. Damit zerfällt das Eigenwertproblem in kleinere Teilprobleme. Für diese Eigenwertprobleme wird im Hinblick auf die Diskretisierung nach Kapitel 6, Abschnitt 3 auch die schwache Form angegeben werden.

Für den unbeschränkten Hamiltonoperator $H : \mathcal{H}^2(N) \subset \mathcal{L}^2(N) \rightarrow \mathcal{L}^2(N)$ nennen wir einen Teilraum $\mathcal{A} \subset \mathcal{L}^2(N)$ *invariant bezüglich* H , falls das Bild von $\mathcal{A} \cap \mathcal{H}^2(N)$ unter H eine Teilmenge von \mathcal{A} ist. Das heißt alle Punkte in \mathcal{A} , für die die Anwendung von H definiert ist, werden nach \mathcal{A} abgebildet.

SATZ 8.7. Sei $N \geq 1$ und $m \in \mathbb{N}$. Definiere für jeden Repräsentanten $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ den Raum

$$(8.11) \quad \mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m(N) := \{A(u_{\vec{\sigma}} \delta_{\vec{\sigma}}) \mid u_{\vec{\sigma}} \in H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{3N})\}.$$

Dann gilt $\mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m(N) = \mathcal{H}^m(N) \cap \mathcal{L}_{\vec{\sigma}}^2(N)$ und

$$\mathcal{H}^m(N) = \bigoplus_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} \mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m(N),$$

wobei die Zerlegung bezüglich $\mathcal{L}^2(N)$ orthogonal ist. Weiterhin gilt

$$H : \mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^2(N) \subset \mathcal{L}_{\vec{\sigma}}^2(N) \rightarrow \mathcal{L}_{\vec{\sigma}}^2(N),$$

d.h. die Räume $\mathcal{L}_{\vec{\sigma}}^2(N)$ sind invariant bezüglich H .

BEWEIS. Die Eigenschaft $\mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m = \mathcal{H}^m \cap \mathcal{L}_{\vec{\sigma}}^2$ folgt direkt aus der Definition der Räume $\mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m$ und $\mathcal{H}^m(N)$, siehe Definition 8.1. Die Tatsache, dass die Räume $\mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^m(N)$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$, den Raum $\mathcal{H}^m(N)$ aufspannen folgt aus Korollar 8.6, da jede antisymmetrische Funktion als Summe von Funktionen in den angegebenen Räumen dargestellt werden kann. Über die Definition des Skalarprodukts in Gleichung (8.6) kann die Orthogonalität leicht gezeigt werden. Es bleibt zu zeigen, dass die Räume $\mathcal{H}_{\vec{\sigma}}^2(N)$ bezüglich des Hamiltonoperators auf

\mathcal{L}_σ^2 abgebildet werden. Da die Operatoren H und A kommutieren, d.h. $HA = AH$ gilt, folgt für $u_\sigma \in H_\sigma^2$

$$H[A(u_\sigma \delta_\sigma)] = A[H(u_\sigma \delta_\sigma)].$$

Für die Ortsfunktion gilt $Hu_\sigma \in L_\sigma^2$, da der Hamiltonoperator symmetrisch bezüglich Vertauschung der Elektronen ist. Weiterhin hängt der Hamiltonoperator nicht von den Spinvariablen ab, so dass die Behauptung folgt. \square

Physikalisch gesehen wird der Raum bezüglich der z -Komponente des Gesamtspins zerlegt, der sich als $N_+ - N_- = 2N_+ - N$ ergibt. Da der Hamiltonoperator den Spin nicht enthält ergibt sich zwangsläufig die Invarianz der entsprechenden Unterräume. Üblicherweise wird das Problem jedoch zuerst in die Eigenräume des Gesamtspins zerlegt und anschließend bezüglich der z -Komponente. Dies ist möglich, da die Operatoren kommutieren. Bei der Regularitätsbetrachtung (Yserentant, 2010a) stellt sich heraus, dass die Aufteilung anhand der z -Komponenten eine verfeinerte Regularitätsanalyse erlaubt, was in Kapitel 9, Abschnitt 3 behandelt wird. Anschließend können die so entstandenen Räume jedoch bezüglich des Betrags des Gesamtspins weiter zerlegt werden.

Das Eigenwertproblem zerfällt somit in Eigenwertproblem in den Räumen $\mathcal{L}_\sigma^2(N)$, $\sigma \in \mathcal{R}_N$. Aufgrund der speziellen Struktur der Räume, siehe Gleichung (8.11), kann die Spinfunktion vollständig entkoppelt werden.

LEMMA 8.8. *Sei $N \geq 1$, $\sigma \in \mathcal{R}_N$ ein Repräsentant und $\psi \in \mathcal{H}_\sigma^2(N)$ eine antisymmetrische Funktion. Dann existiert nach Definition des Raumes in Gleichung (8.11) eine Funktion $u_\sigma \in H_\sigma^2(N)$, so dass*

$$\psi = A(u_\sigma \delta_\sigma)$$

gilt. Die Funktion ψ ist genau dann Eigenfunktion von H , wenn die Ortskomponente $u_\sigma \in H_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine Eigenfunktion ist. Dabei stimmen die Eigenwerte überein.

BEWEIS. Sei $\psi \in \mathcal{H}_\sigma^2$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert E . Dann muss die Eigenwertgleichung ebenfalls für die Komponenten $\psi(\cdot, \sigma)$ gelten und damit für u_σ . Da $\psi \neq 0$ gilt muss ebenfalls $u_\sigma \neq 0$ gelten, das heißt u_σ ist eine Eigenfunktion. Zum Beweis der Gegenrichtung sei $u_\sigma \in H_\sigma^2$ eine Eigenfunktion. Aus der Kommutatorgleichung $HA = AH$ und

$$HA(u_\sigma \delta_\sigma) = AH(u_\sigma \delta_\sigma).$$

folgt, dass $A(u_\sigma \delta_\sigma)$ ebenfalls die Eigenwertgleichung zum gleichen Eigenwert erfüllt. Zudem gilt $A(u_\sigma \delta_\sigma) \neq 0$ falls $u_\sigma \neq 0$ gilt. \square

Als Konsequenz des letzten Lemmas folgt also, dass die Eigenwertprobleme

$$(8.12) \quad Hu = Eu, \quad u \in H_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N}) \setminus \{0\}$$

für alle Repräsentanten $\sigma \in \mathcal{R}_N$ gelöst werden müssen, insgesamt also N Eigenwertprobleme. Dabei kann man die Anzahl der Probleme auf $\lfloor N/2 \rfloor$ beschränken, da die Räume $H_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ und $H_{\sigma'}^2(\mathbb{R}^{3N})$ für $\sigma, \sigma' \in \mathcal{R}_N$ mit $N_+ = N - N'_+$ mit der Notation von Gleichung (8.8) identisch sind.

Das Spektrum von H auf $\mathcal{L}^2(N)$ setzt sich demnach aus den Spektren der entsprechenden Probleme auf $L_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ zusammen. Der Raum $L_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$, in dem das Eigenwertproblem (8.12) gestellt ist, ist dabei selbst wieder ein bezüglich H invarianter Teilraum von $L^2(\mathbb{R}^{3N})$. Aus den Aussagen über das Spektrum auf dem Gesamtraum $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ können somit Eigenschaften der Spektren auf $L_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ gefolgert werden.

Die Eigenwertprobleme aus Gleichung (8.12) können ebenfalls in der schwachen Form analog zu Kapitel 6, Abschnitt 3 formuliert werden. Grundlegend für diese Überlegungen ist folgende Abschätzung für das Potential.

SATZ 8.9 (Hardy-Ungleichung). Sei $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$. Dann gilt

$$\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{|\mathbf{x}|^2} |u(\mathbf{x})|^2 \, d\mathbf{x} \leq 4 \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla u(\mathbf{x})|_2^2 \, d\mathbf{x}.$$

Gilt $u \in H^2(\mathbb{R}^6)$ dann folgt daraus ebenfalls

$$\int_{\mathbb{R}^6} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} |u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \leq 2 \int_{\mathbb{R}^6} |\nabla u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y}.$$

Für einen Beweis siehe z.B. (Yserentant, 2010a). Mit Hilfe dieser Aussage kann man das Eigenwertproblem auf H^1 formulieren. Der folgende Satz fasst die Ergebnisse von (Yserentant, 2010a) zusammen.

SATZ 8.10. Sei $N \geq 1$ und $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$. Dann ist der Hamiltonoperator H aus Gleichung (8.4) eine lineare und stetige Abbildung

$$H : H_{\vec{\sigma}}^1(\mathbb{R}^{3N}) \rightarrow (H_{\vec{\sigma}}^1(\mathbb{R}^{3N}))',$$

von $H_{\vec{\sigma}}^1(\mathbb{R}^{3N})$ in seinen Dualraum. Setzt man weiterhin

$$(8.13) \quad \mu \geq 9N^3 + 1/4,$$

so folgt ebenso die starke Positivität des verschobenen Operators:

$$\langle (H + \mu E)u, u \rangle \geq \frac{1}{4} \|u\|_1^2.$$

Dabei ist E der durch das innere Produkt von $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ induzierte Operator, siehe Gleichung (6.7).

Dieser Satz legt somit die Grundlage, um die Theorie über die Diskretisierung von Eigenwertproblemen, wie sie in Kapitel 6, Abschnitt 3 vorgestellt wurde, anzuwenden. Weiterhin ist diese Formulierung der Ausgangspunkt der Regularitätstheorie über die Existenz von höheren gemischten, exponentiell abfallenden Ableitungen, siehe (Yserentant, 2010a).

Eigenschaften des Spektrums und der Eigenfunktionen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit den Eigenschaften der Eigenwerte und der zugehörigen Eigenfunktionen der elektronischen Schrödingergleichung. Dabei werden Aussagen sowohl über die qualitative Struktur des Spektrums als auch das Verhalten der Eigenfunktionen angegeben.

Abschnitt 1 gibt die zentralen Resultate über das Spektrum des Hamiltonoperator wieder. Grundlegend dafür ist die Formulierung des Eigenwertproblems über einen selbstadjungierten unbeschränkten Operator, siehe dazu (von Neumann, 1932; Hislop und Sigal, 1996). Als zentrales Resultat erhält man, dass bei stabilen Verbindungen der untere Teil des Spektrums diskret ist und das kontinuierliche Spektrum darüber liegt.

Der darauffolgende Abschnitt 2 beschäftigt sich mit den Eigenschaften der Wellenfunktion. Zum einen zeigt sich, dass die Eigenfunktionen und ihre Ableitungen exponentiell abfallen (Agmon, 1981) und zum anderen, dass die Wellenfunktionen eine gewisse klassische Regularität besitzen.

Der letzte Abschnitt enthält die zentrale Aussage für diese Arbeit. Dort wird das Ergebnis von Yserentant (Yserentant, 2010a) über die Existenz und das Abklingverhalten gemischter Ableitungen höherer Ordnung zusammengefasst.

1. Spektraleigenschaften

Im vorliegenden Abschnitt werden grundlegende Eigenschaften über das Spektrum des Eigenwertproblems $H\psi = E\psi$ zusammengetragen. Die Hauptaussage ist dabei, dass für sogenannte stabile Verbindungen der untere Bereich des Spektrums diskret ist. Die Aussagen für das volle Problem unter Berücksichtigung des Spins können, wie in Kapitel 8, Abschnitt 2 erklärt, aus den Aussagen über die Spektren des Hamiltonoperators H auf den Räumen $L^2_{\vec{\sigma}}(\mathbb{R}^{3N})$ gefolgert werden.

Für eine gegebene Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ für N Elektronen gibt

$$\Lambda(\vec{\sigma}) = \inf \{ \langle Hu, u \rangle \mid \|u\|_0 = 1, u \in H^2_{\vec{\sigma}}(\mathbb{R}^{3N}) \}$$

die kleinste Energie an, die für die gegebene Spinkonfiguration erreicht werden kann. Durch die Halbbeschränktheit des Hamiltonoperators H gilt $\Lambda(\vec{\sigma}) > -\infty$ und $\Lambda(\vec{\sigma})$ ist Teil des Spektrums (Weidmann, 2000).

Die Eigenwerte des Hamiltonoperators aus Gleichung (8.3) spielen eine Hauptrolle für die Existenz gebundener Zustände. Als erstes konnte Kato (Kato, 1951b) beweisen, dass das Spektrum des Heliumatoms in der Born-Oppenheimer Näherung unendlich viele Punkte besitzt und dass der Grundzustand existiert. Dieses Ergebnis konnte von Zhislin (Zhislin, 1960), Hunziker (Hunziker, 1966) und van Winter (van Winter, 1964; van Winter, 1965) unabhängig voneinander noch verallgemeinert werden. Siehe dazu auch den Übersichtsartikel (Hunziker und Sigal, 2000), sowie die Lehrbücher (Weidmann, 2000; Weidmann, 2003; Hislop und Sigal, 1996; Gustafson und Sigal, 2003).

Definiere dazu für eine gegebene Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$

$$\Sigma(R, \vec{\sigma}) = \inf \{ \langle Hu, u \rangle \mid u \in H^2_{\vec{\sigma}}(\mathbb{R}^{3N}), u(\vec{x}) = 0 \text{ für } |\vec{x}|_2 \leq R, \|u\|_0 = 1 \}.$$

Physikalisch kann dies als die kleinste Energie des Systems interpretiert werden, bei dem sich mindestens ein Elektron außerhalb einer Kugel mit dem Nullpunkt als Zentrum und dem Radius R befindet. Lässt man nun das Elektron im Unendlichen verschwinden ergibt sich die Ionisierungsschwelle

$$\Sigma(\vec{\sigma}) := \lim_{R \rightarrow \infty} \Sigma(R, \vec{\sigma}).$$

Der folgende Satz fasst die Aussagen aus den oben genannten Arbeiten und (Yserentant, 2010a) zusammen.

SATZ 9.1. *Sei $N \geq 1$. Zu einer gegebenen Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ besteht das Spektrum unterhalb der Ionisierungsschwelle $\Sigma(\vec{\sigma})$ nur aus einem diskreten Spektrum. Das wesentliche Spektrum ist nicht leer und Teilmenge von $[\Sigma(\vec{\sigma}), \infty)$.*

Aus dem Satz folgt für den Fall $\Lambda(\vec{\sigma}) < \Sigma(\vec{\sigma})$, dass der Grundzustand ein isolierter Eigenwert mit zugehörigem endlichdimensionalen Eigenraum ist. Die Aussage über das wesentliche Spektrum kann wahrscheinlich durch eine genauere Analyse des HVZ-Theorems im Hinblick auf die vorliegende Symmetriebedingung noch verbessert werden, siehe dazu die Diskussion in (Reed und Simon, 1978, Theorem XIII.17').

Für das volle Eigenwertproblem unter Berücksichtigung des Spins definiere die entsprechenden Größen

$$\Lambda = \min_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} \Lambda(\vec{\sigma}), \quad \Sigma = \min_{\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N} \Sigma(\vec{\sigma}).$$

Aus den obigen Aussagen bezüglich der einzelnen Teilsysteme folgt damit, dass das Spektrum unterhalb von Λ diskret ist und das wesentliche Spektrum oberhalb von Σ liegt. Für stabile Atome und Moleküle wird man annehmen, dass die Grundzustandsenergie Λ niedriger ist als die Ionisierungsschwelle, d.h. dass $\Lambda < \Sigma$ gilt.

2. Eigenschaften der Eigenfunktionen

In diesem Abschnitt werden die Wellenfunktionen gebundener Zustände untersucht. Die Hauptaussage ist dabei, dass die Wellenfunktionen exponentiell abklingen und außerhalb der Coulomb-Singularitäten analytisch sind. Weiterhin kann das Verhalten an den Singularitäten genauer beschrieben werden.

Wir beginnen mit der Lokalisierung von Eigenfunktionen zu Eigenwerten $\lambda < \Sigma$, die im Folgenden über die Mitgliedschaft in gewichteten Sobolevräumen, siehe Definition 3.1, formuliert wird. Es gilt folgende Aussage, siehe zum Beispiel (Yserentant, 2010a).

SATZ 9.2. *Sei $N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine gegebene Spinkonfiguration und $u \in H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine Eigenfunktion von H zum Eigenwert $\lambda < \Sigma(\vec{\sigma})$. Dann gilt für die Eigenfunktion u*

$$(9.1) \quad u \in H^1((\mathbb{R}^3)^N, w_{\gamma}) \quad \gamma < \sqrt{8(\Sigma(\vec{\sigma}) - \lambda)/N},$$

das heißt u und Ableitungen erster Ordnung fallen in diesem Sinne exponentiell ab. Die Gewichtsfunktion w_{γ} ist dabei in Gleichung (5.1) definiert.

Die Wellenfunktionen und ihre ersten Ableitungen gebundener Zustände fallen somit im L^2 -Sinne exponentiell ab. Eine Übersicht über dieses Thema und weitere Abschätzungen findet man in der Monographie von Agmon (Agmon, 1981), wo auch weiterführende Arbeiten angegeben sind.

Neben dem Abklingverhalten ist ebenfalls auch die Regularität der Wellenfunktionen interessant. Aus der Definition des Eigenwertproblems im Raum $H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$ folgt automatisch, dass die Eigenfunktionen zwei mal schwach differenzierbar sind. Kato hat weiterhin in (Kato, 1957) auch die Regularität der Wellenfunktion im klassischen Sinne untersucht. Er konnte zeigen, dass die Wellenfunktionen stetig sind und beschränkte erste Ableitungen,

ausgenommen an den Coulomb-Singularitäten, besitzen. Mehr noch ist die Wellenfunktion außerhalb der Coulomb-Singularitäten analytisch (Hopf, 1931).

Weiterhin kann man ebenfalls die genaue Form der Wellenfunktion an den Coulomb-Singularitäten angeben. Exemplarisch sei dies hier am Beispiel der Helium-Wellenfunktion aufgezeigt. Es gilt mit Parametern $r_{1/2} = |\mathbf{x}_{1/2}|_2$ für das Verhalten am Kern

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \hat{u}^1}{\partial r_1} \right)_{r_1=0} &= -2u(\mathbf{0}, \mathbf{x}_2), \quad \mathbf{x}_1 \neq 0 \\ \left(\frac{\partial \hat{u}^2}{\partial r_2} \right)_{r_2=0} &= -2u(\mathbf{x}_1, \mathbf{0}), \quad \mathbf{x}_2 \neq 0, \end{aligned}$$

wobei $\hat{u}^{1/2}$ die Mittlung von u für $r_{1/2} = \text{const}$ ist. An der Elektron-Elektron-Singularität verhält sich die Wellenfunktion gemäß

$$\left(\frac{\partial \hat{u}^{12}}{\partial r_{12}} \right)_{r_{12}=0} = u\left(\frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2), \frac{1}{2}(\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2)\right), \quad \mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2 \neq 0,$$

wobei $r_{12} = |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|_2$ und \hat{u}^{12} die Mittlung von u für $r_{12} = \text{const}$ ist. Demnach verhält sich die Wellenfunktion an den singulären Punkten in etwa so, wie die Wasserstoff-Wellenfunktion am Kern. Genauer gilt nahe des Kerns eine Abhängigkeit wie $e^{-2|\mathbf{x}_1|_2}$ und auf der Diagonalen $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ ein Verhalten wie $1 + 1/2 r_{12}$.

Mit Kenntnis der Singularitäten kann man nun versuchen, die Wellenfunktion multiplikativ in

$$u(\vec{\mathbf{x}}) = e^{F(\vec{\mathbf{x}})} \cdot v(\vec{\mathbf{x}})$$

zu zerlegen. Hierbei soll im ersten Faktor der singuläre Teil abgedeckt werden, wodurch v regulärer wird. Setzt man

$$\begin{aligned} F_2(\vec{\mathbf{x}}) &= - \sum_{\nu=1}^M \sum_{i=1}^N Z_\nu |\mathbf{x}_i - \mathbf{a}_\nu|_2 + \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i < j \leq N} |\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j|_2, \\ F_3(\vec{\mathbf{x}}) &= \frac{2 - \pi}{12\pi} \sum_{\nu=1}^M \sum_{1 \leq i < j \leq N} Z_\nu \langle \mathbf{x}_i - \mathbf{a}_\nu, \mathbf{x}_j - \mathbf{a}_\nu \rangle \log(|\mathbf{x}_i - \mathbf{a}_\nu|_2^2 + |\mathbf{x}_j - \mathbf{a}_\nu|_2^2). \end{aligned}$$

und $F = F_2 + F_3$, so konnten Fournais, M. und T. Hoffmann-Ostenhof und Østergaard Sørensen (Fournais et al., 2005) zeigen, dass v in $C^{1,1}$ liegt und somit die Ableitungen erster Ordnung Lipschitz-stetig sind.

3. Existenz exponentiell gewichteter gemischter Ableitung

Die bisher vorgestellten Glattheitseigenschaften reichen jedoch noch nicht aus, um den Fluch der Dimensionen (Bellman, 1957) zu brechen: Mit zunehmender Anzahl der Teilchen N wächst der Aufwand die zugehörigen Wellenfunktionen zu diskretisieren exponentiell in N . Wählt man zum Beispiel als Diskretisierung 100 Gitterpunkte in jeder Dimension ergibt dies bei N Elektronen 10^{6N} Freiheitsgrade. Schon für das Wassermolekül H_2O mit zehn Elektronen ergibt dies eine unglaubliche Zahl mit 60 Nullen. Für die Schwierigkeit der Approximation von hochdimensionalen Funktionen siehe auch Kapitel 2.

Mit Hinblick auf die Eigenschaften der Wellenfunktion aus Abschnitt 1 kann man jedoch nicht erwarten, dass die klassische Regularität mit der Anzahl der Dimensionen wächst. Vernachlässigt man zum Beispiel die Elektron-Elektron-Wechselwirkung und betrachtet N Elektronen im Feld eines Kerns mit Ladung $Z = N$, so kann man zeigen, dass die Wellenfunktion ein antisymmetrisches Produkt von Wasserstoffwellenfunktionen ist. Im Grundzustand muss dabei mindestens ein Faktor der Art $e^{-Z|\mathbf{x}_i|_2}$ vorkommen. Daher kann in diesem Fall die Regularität im Sinne von Sobolevräumen nur kleiner als $5/2$ sein, wie

man schnell durch die Fouriertransformation dieses Faktors berechnen kann, siehe dazu auch (Yserentant, 2010a).

Dennoch wird die Funktion mit wachsender Anzahl von Teilchen regulärer. Wie Yserentant (Yserentant, 2010a) zeigen konnte liegen die Eigenfunktionen $u \in H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$ in gewissen gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung.

SATZ 9.3. *Sei $N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration und $u \in H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert λ unterhalb des kontinuierlichen Spektrums $\Lambda(\vec{\sigma})$. Sei weiterhin durch $\Omega \geq 12N^{3/2} + 6\gamma N^{1/2}$ ein Skalierungsparameter im Frequenzraum gegeben. Dann ist der Ausdruck*

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + \left|\frac{\vec{\omega}}{\Omega}\right|_2^2\right) \left[\prod_{i:\sigma_i=+1/2} \left(1 + \left|\frac{\omega_i}{\Omega}\right|_2^2\right) + \prod_{i:\sigma_i=-1/2} \left(1 + \left|\frac{\omega_i}{\Omega}\right|_2^2\right) \right] |\widehat{w_{\gamma/2}u}(\omega)|^2 d\vec{\omega}$$

endlich, falls $\gamma < \sqrt{8(\Sigma(\vec{\sigma}) - \lambda)/N}$ gilt.

Die sich ergebenden Räume stimmen jedoch nicht exakt mit den gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung aus Definition 3.1 überein. Im Folgenden soll daher ein Raum der Form $H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_{\gamma})$ bestimmt werden, in dem die Eigenfunktionen liegen. Zum einen kann der Parameter Ω bei einer geeigneten Umskalierung der Variablen \vec{x} entfernt werden. Setze dazu

$$(9.2) \quad v(\vec{y}) = \Omega^{-Nd/2} u(\vec{y}/\Omega)$$

für alle $\vec{y} \in \mathbb{R}^{dN}$ und $\gamma' = \gamma/\Omega$. Dann ist der Ausdruck

$$(9.3) \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + |\vec{\omega}|_2^2\right) \left[\prod_{i:\sigma_i=+1/2} \left(1 + |\omega_i|_2^2\right) + \prod_{i:\sigma_i=-1/2} \left(1 + |\omega_i|_2^2\right) \right] |\widehat{w_{\gamma'/2}v}(\omega)|^2 d\vec{\omega}$$

endlich und besitzt sogar den gleichen Wert wie der in Satz 9.3. Der Parameter $1/\Omega$ kann dabei als charakteristische Wellenlänge des zugrunde liegenden Systems interpretiert werden, während $1/\gamma$ die gesamte Ausdehnung des Systems beschreibt. Der Wert γ' gibt somit das Verhältnis zwischen einer charakteristischen Längenskala und der Gesamtausdehnung wieder. Im Weiteren wählen wir das Koordinatensystem \vec{y} und bezeichnen die Funktion wieder mit u .

Durch die Ungleichung zwischen algebraischem und geometrischen Mittel folgt

$$\prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2)^{1/2} \leq \frac{1}{2} \left[\prod_{i:\sigma_i=+1/2} (1 + |\omega_i|_2^2) + \prod_{i:\sigma_i=-1/2} (1 + |\omega_i|_2^2) \right].$$

Somit wird der Term

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + |\vec{\omega}|_2^2\right) \left[\prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2) \right]^{1/2} |\widehat{w_{\gamma'/2}v}(\omega)|^2 d\vec{\omega}$$

durch den Ausdruck in Gleichung (9.3) dominiert und ist also endlich.

Allgemeiner wollen wir nun Funktionen untersuchen, für die der obige Term endlich ist, wenn der Exponent $1/2$ der eckigen Klammern durch $0 \leq s \leq 1$ ersetzt wird. Eine laufende Untersuchung (Kreusler, 2010) deutet darauf hin, dass dieser Ausdruck für gebundene Zustände nicht nur für $s = 1/2$, sondern sogar für $s < 3/4$ endlich bleibt. Dies bedeutet, dass die Eigenfunktionen regulärer sind als in Satz 9.3 angegeben.

LEMMA 9.4. *Sei $N \geq 1$, $\gamma \geq 0$, $0 \leq s \leq 1$ und eine Funktion v gegeben, so dass*

$$(9.4) \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + |\vec{\omega}|_2^2\right) \left[\prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2) \right]^s |\widehat{w_{\gamma/2}v}(\omega)|^2 d\vec{\omega}$$

endlich ist. Dann wird die Norm $\|u\|_{\text{mix},w_{\gamma},s,1}^2$ durch diesen Ausdruck dominiert.

BEWEIS. Der Beweis wird mittels der Interpolationstheorie geführt. Für den Fall $s = 0$ ist die Behauptung offensichtlich. Der Fall $s = 1$ wird in (Yserentant, 2010a) gezeigt. Bezeichne nun für ein festes γ mit X^s den Raum aller messbaren Funktionen, so dass der Ausdruck (9.4) endlich ist. Die Abbildung

$$\text{Id} : X^s \rightarrow H_{\text{mix}}^{s,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma)$$

ist somit für $s = 0$ und $s = 1$ stetig, das heißt beschränkt. Die Interpolationsräume können nun analog zu Satz 3.6 für $0 < \theta < 1$ zu

$$[X^0, X^1]_{\theta,2} = X^\theta$$

bestimmt werden. Auf der anderen Seite gilt nach Definition 3.2

$$\left[H_{\text{mix}}^{0,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma), H_{\text{mix}}^{1,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma) \right]_{\theta,2} = H_{\text{mix}}^{\theta,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_\gamma)$$

so dass die Aussage mit Satz A.4 folgt. \square

Der folgende Satz fasst die Überlegungen zusammen.

SATZ 9.5. Sei $N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration und $u \in H_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert λ mit $\lambda < \Sigma(\vec{\sigma})$. Wähle weiterhin Parameter $\gamma, \Omega \in \mathbb{R}$, so dass

$$\gamma < \sqrt{8(\Sigma(\vec{\sigma}) - \lambda)/N}, \quad \Omega \geq 12N^{3/2} + 6\gamma N^{1/2}$$

gilt und setze $\gamma' = \gamma/\Omega$. Dann ist die entsprechend skalierte Funktion

$$v = \Omega^{-3N/2} u(\cdot/\Omega)$$

ein Element von $H_{\text{mix}}^{1/2,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_{\gamma'})$.

Damit kann die Approximation der Eigenfunktionen gebundener Zustände auf die Approximation von Funktionen in exponentiell gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung zurückgeführt werden. Auf diesem Weg können alle Ergebnisse der Approximation von Kapitel 5 angewendet werden. Die Wellenfunktion besitzt jedoch zusätzlich als Element von $H_\sigma^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine partielle Antisymmetrie. Das folgende Kapitel behandelt die Auswirkungen dieser zusätzlichen Struktur auf die Approximation und zeigt, dass dadurch bessere Approximationsraten erzielt werden können.

Approximation antisymmetrischer Funktionen

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit der Approximation partiell antisymmetrischer Funktionen, die zusätzlich in exponentiell gewichteten Sobolevräumen gemischter Ordnung liegen. Nach der Aussage von Satz 9.5 kann damit ebenfalls die Approximationsrate einer Eigenfunktion eines gebundenen Zustands bestimmt werden.

Allgemein wird die Approximation von Funktionen $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ betrachtet, die bezüglich einer Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ im Sinne von Definition 8.5 antisymmetrisch sind, wobei der Fehler in der H^m -Norm gemessen wird. Zur Approximation werden nun die dünnen Gitter aus Kapitel 5 verwendet, die jedoch zusätzlich antisymmetrisiert werden. Es zeigt sich, dass dadurch einige Basisfunktionen entfallen und die Konvergenzrate verbessert werden kann.

Insgesamt erhält man eine Konvergenzrate, die unabhängig von der Anzahl der Dimensionen ist. Der Fluch der Dimensionen ist somit für partiell antisymmetrische Funktionen in dieser Hinsicht gebrochen. Insbesondere folgt daraus, dass gebundene Zustände der Schrödingergleichung mit einer Rate approximiert werden können, die unabhängig von der Anzahl der Teilchen ist.

Im ersten Abschnitt wird ein, bezüglich des H^m -Skalarprodukts, orthogonaler Projektor auf den Raum der antisymmetrischen Funktionen angegeben. Mit Hilfe dieses Operators werden im zweiten Abschnitt die Dünngitterräume aus Kapitel 5 partiell antisymmetrisiert. Bezüglich dieser Räume werden anschließend die entsprechenden Approximationsraten hergeleitet.

1. Bestapproximation von antisymmetrischen Funktionen

In diesem Abschnitt wird ein orthogonaler Projektor auf den Raum $H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$ angegeben. Als Folgerung muss eine Bestapproximation nur in diesem Raum gesucht werden.

LEMMA 10.1. Sei $d, N \geq 1$ und $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Definiere den partiellen Antisymmetrisierungsoperator $A_{\vec{\sigma}}$ für Funktionen $u \in L^2(\mathbb{R}^{dN})$ durch

$$(10.1) \quad (A_{\vec{\sigma}}u)(\vec{x}) = \frac{1}{N_+!N_-!} \sum_{P:P\vec{\sigma}=\vec{\sigma}} \text{sign}(P)u(P\vec{x}),$$

wobei N_{\pm} jeweils die Anzahl der Einträge in $\vec{\sigma}$ mit $\pm 1/2$ angibt. Dann ist $A_{\vec{\sigma}}$ bezüglich des inneren Produktes auf $H^m(\mathbb{R}^{dN})$ für alle $m \in \mathbb{N}$ ein orthogonaler Projektor auf den Raum der partiell antisymmetrischen Funktionen $H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$.

BEWEIS. Als erstes wird gezeigt, dass der Operator $A_{\vec{\sigma}}$ auf $H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$ die Identität ist. Sei dazu u ein Element dieses Raumes. Dann gilt nach Definition

$$(A_{\vec{\sigma}}u)(\vec{x}) = \frac{1}{N_+!N_-!} \sum_{P:P\vec{\sigma}=\vec{\sigma}} \text{sign}(P)u(P\vec{x}).$$

Da u partiell antisymmetrisch ist folgt $u(P\vec{x}) = \text{sign}(P)u(\vec{x})$ für die Permutationen P der Summe. Aus der Tatsache, dass die Summe $N_+!N_-!$ Permutationen dieses Typs umfasst, folgt $A_{\vec{\sigma}}u = u$.

Zweitens gilt, dass $A_{\vec{\sigma}}$ als Abbildung von $H^m((\mathbb{R}^d)^N)$ das Bild $H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$ besitzt. Zu diesem Zweck wähle eine Permutation $Q \in S_N$ mit $Q\vec{\sigma} = \vec{\sigma}$. Dann gilt nach Definition für eine Funktion $u \in H^m((\mathbb{R}^d)^N)$

$$(A_{\vec{\sigma}}u)(Q\vec{x}) = \frac{1}{N_+! N_-!} \sum_{P: P\vec{\sigma}=\vec{\sigma}} \text{sign}(P)u(PQ\vec{x}).$$

Die Permutationen, die $\vec{\sigma}$ invariant lassen, sind wiederum eine Untergruppe von S_N . Da das Vorzeichen einer Permutation multiplikativ ist, das heißt es gilt $\text{sign}(PQ) = \text{sign}(P) \cdot \text{sign}(Q)$ und ebenfalls $\text{sign}(P^{-1}) = \text{sign}(P)$, folgt mit $P' = PQ$

$$(A_{\vec{\sigma}}u)(Q\vec{x}) = \text{sign}(Q) \cdot \frac{1}{N_+! N_-!} \sum_{P': P'\vec{\sigma}=\vec{\sigma}} \text{sign}(P')u(P'\vec{x}).$$

und damit $(A_{\vec{\sigma}}u)(Q\vec{x}) = \text{sign}(Q)(A_{\vec{\sigma}}u)(\vec{x})$. Also liegt $A_{\vec{\sigma}}u$ in $H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$.

Als letztes muss nun gezeigt werden, dass $A_{\vec{\sigma}}$ bezüglich des Skalarprodukts auf $H^m((\mathbb{R}^d)^N)$ selbstadjungiert ist. Zum einen gilt für die Fourierdarstellung

$$\widehat{(A_{\vec{\sigma}}u)}(\vec{\omega}) = (A_{\vec{\sigma}}\hat{u})(\vec{\omega}).$$

und für jede Permutation $P \in S_N$

$$\langle u(P\cdot), v \rangle_m = \int_{\mathbb{R}^{dN}} (1 + |\vec{\omega}|^2)^m \hat{u}(P\vec{\omega}) \cdot \hat{v}(\vec{\omega}) \, d\vec{\omega} = \langle u, v(P\cdot) \rangle_m$$

durch Umparametrisierung. Aus der Linearität des Integrals folgt damit die Symmetrie und durch die Beschränktheit des Operators $A_{\vec{\sigma}}$ somit auch die Selbstadjungiertheit. \square

Mit Hilfe des Projektors kann nun folgendes Resultat gezeigt werden.

LEMMA 10.2. *Sei $d, N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ und $u \in H_{\vec{\sigma}}^m(\mathbb{R}^{dN})$ eine partiell antisymmetrische Funktion für $m \in \mathbb{N}$. Sei $\tilde{u} \in H^m(\mathbb{R}^{dN})$ eine Approximation. Dann gilt für den Fehler*

$$\|u - \tilde{u}\|_m^2 = \|u - A_{\vec{\sigma}}\tilde{u}\|_m^2 + \|(\text{Id} - A_{\vec{\sigma}})\tilde{u}\|_m^2.$$

Somit approximiert $A_{\vec{\sigma}}\tilde{u}$ die Funktion u mindestens so gut wie \tilde{u} . Die Bestapproximation ist damit automatisch immer antisymmetrisch.

BEWEIS. Es gilt nach Voraussetzung $A_{\vec{\sigma}}u = u$. Damit folgt

$$\|u - \tilde{u}\|_m^2 = \|A_{\vec{\sigma}}u - [A_{\vec{\sigma}}\tilde{u} + (\text{Id} - A_{\vec{\sigma}})\tilde{u}]\|_m^2.$$

Aus der Orthogonalität des Projektors kann der Ausdruck in

$$\|u - \tilde{u}\|_m^2 = \|u - A_{\vec{\sigma}}\tilde{u}\|_m^2 + \|(\text{Id} - A_{\vec{\sigma}})\tilde{u}\|_m^2$$

zerlegt werden. Damit folgt die Behauptung. \square

2. Antisymmetrische dünne Gitter

Nach den Ergebnissen des letzten Abschnittes ist es sinnvoll, zur Approximation partiell antisymmetrischer Funktionen nur Ansatzfunktionen zu verwenden, die die gleiche Symmetrie aufweisen. Die Approximationsresultate aus Kapitel 5 bleiben somit bestehen, wenn eine partiell antisymmetrische Funktion durch partiell antisymmetrisierte dünne Gitter approximiert wird. Die Antisymmetrisierung bedingt jedoch eine Verkleinerung des Raumes, so dass für die gleiche Genauigkeit weniger Ansatzfunktionen benötigt werden. Die Auswirkungen auf die Konvergenzrate werden in diesem Abschnitt untersucht.

Wir beginnen mit der Definition der zugrunde liegenden Approximationsräume.

DEFINITION 10.3. Sei $N \geq 1$, $s, \gamma > 0$ und eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ gegeben, sowie die in Definition 5.4 definierten Räume $\{V_\ell\}_{\ell \in \mathbb{N}}$. Das gemäß Definition 5.3 konstruierte antisymmetrische dünne Gitter $G_L(\vec{\sigma})$ der Stufe $L \in \mathbb{N}$ ist durch

$$G_L(\vec{\sigma}) = \text{span}\{A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Phi_L\}$$

mit der Indexmenge Φ_L aus Gleichung (5.6) gegeben.

Durch die Antisymmetrisierung werden nun zum einen Ansatzfunktionen auf Null abgebildet, falls innerhalb einer Spingruppe nicht alle Indizes paarweise verschieden sind. Zum anderen können verschiedene Indizes $\vec{\lambda} \neq \vec{\lambda}'$ bis auf Vorzeichen dieselbe Funktion ergeben, das heißt es gilt

$$(10.2) \quad A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}} = \pm A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}'}$$

Das bedeutet, dass die Mächtigkeit des antisymmetrisierten Dünngitterraumes im Allgemeinen kleiner ist als ohne Symmetriebedingung und daher die Indexmenge verkleinert werden kann. Im Folgenden wollen wir eine Teilmenge von Φ_L auswählen, die ausreicht um den Raum $G_L(\vec{\sigma})$ aufzuspannen.

LEMMA 10.4. Sei $N \geq 1$, $s, \gamma > 0$ und eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ gegeben. Definiere die Indexmenge

$$(10.3) \quad \Phi_L(\vec{\sigma}) = \bigcup \{\phi_{\vec{\ell}} \mid \vec{\ell}|_{I_+} \text{ und } \vec{\ell}|_{I_-} \text{ monoton fallend}\}$$

wobei $I_+ = \{1, \dots, N_+\}$ und $I_- = \{N_+ + 1, \dots, N\}$. Dann gilt

$$G_L(\vec{\sigma}) = \text{span}\{A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Phi_L(\vec{\sigma})\}.$$

Somit reichen die Indizes in $\Phi_L(\vec{\sigma})$ aus, um das antisymmetrische dünne Gitter aufzuspannen.

BEWEIS. Sei ein Index $\vec{\lambda} \in \Phi_L$ gegeben. Für jede Spingruppe I_+ und I_- getrennt werden die Indizes innerhalb der Gruppe so vertauscht, dass die Stufen $|\lambda_i|$ monoton fallend sind. Die so entstehenden Funktionen sind bis auf das Vorzeichen mit den ursprünglichen identisch, d.h. es gilt Gleichung (10.2). Somit kann man sich auf solche Indizes beschränken, die diese Ordnung aufweisen und die Behauptung folgt. \square

Die so angegebene Indexmenge wird den Raum weiterhin redundant aufspannen, da z.B. in $\Phi_L(\vec{\sigma})$ Indexmengen $\phi_{\vec{\ell}}$ enthalten sind, für die innerhalb einer Spingruppe zwei Indizes ℓ_i und ℓ_j übereinstimmen. In den entsprechenden Räumen $Z_{\vec{\ell}}$, siehe Gleichung (5.3), liegen Funktionen, die durch Antisymmetrisierung auf Null abgebildet werden. Dennoch enthält der so antisymmetrisierte Raum auch Basiselemente von $G_L(\vec{\sigma})$. Somit kann die Indexmenge $\Phi_L(\vec{\sigma})$ weiter verkleinert werden. Eine Basis wird explizit in Kapitel 11, Abschnitt 1 konstruiert. Jedoch ist es schwer, von diesen Mengen die Mächtigkeit zu bestimmen.

Auf diesem antisymmetrischen dünnen Gitter kann nun die Genauigkeit der Approximation einer antisymmetrischen Funktion in Abhängigkeit von der Stufe abgeschätzt werden. Dabei ergibt sich das gleiche Resultat wie in Satz 5.6.

LEMMA 10.5. Sei $N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $s, \gamma > 0$ mit $m + s < \tau$, wobei τ die Schranke der Normäquivalenz ist. Für eine bezüglich der Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ antisymmetrische Funktion u konstruiere die Approximante u_L mit

$$u_L := \sum_{\vec{\lambda} \in \Phi_L} u_{\vec{\lambda}} A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}}, \quad \text{wobei } u_{\vec{\lambda}} = \langle \psi_{\vec{\lambda}}, u \rangle_0.$$

Dann gilt die Fehlerabschätzung

$$\|u - u_L\|_m \lesssim C_\gamma^{m\xi/2} \cdot 2^{-L} \cdot \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$$

bezüglich der $H^m((\mathbb{R}^d)^N)$ -Norm, wobei n_ε wie in Satz 4.5 definiert ist. Die Konstante ist dabei unabhängig von L und γ .

BEWEIS. Nach Satz 5.6 approximiert die Funktion

$$\tilde{u}_L = \sum_{\bar{\lambda} \in \Phi_L} u_{\bar{\lambda}} \psi_{\bar{\lambda}}$$

die Funktion u in der H^m -Norm bis auf die in der Abschätzung angegebene Faktor genau. Nach Lemma 10.2 folgt damit, dass $u_L = A_{\vec{\sigma}} \tilde{u}_L$ die antisymmetrische Funktion u mindestens ebenso gut approximiert, womit die Behauptung folgt. \square

Um die Mächtigkeit der Indexmenge $\Phi_L(\vec{\sigma})$ abzuschätzen benötigen wir folgendes Resultat.

LEMMA 10.6. Sei $k \in \mathbb{N}$. Die Anzahl aller monoton fallenden Folgen natürlicher Zahlen $k_1 \geq k_2 \geq \dots$ mit Summe k heißt die Zerlegungszahl $p(k)$. Diese kann dabei durch

$$p(k) \lesssim \frac{e^{2\sqrt{2k}}}{k}$$

abgeschätzt werden, wobei die Konstante unabhängig von k gewählt werden kann.

Die Zerlegungszahl ist eine grundlegende Größe in der Zahlentheorie und wurde zum Beispiel in (Euler, 1753; Hardy und Ramanujan, 1918) behandelt. Einen Beweis für die angegebene, nicht optimale, Abschätzung findet sich in (Yserentant, 2010a). Mit Hilfe dieser Abschätzung kann asymptotisch die Mächtigkeit des partiell antisymmetrisierten dünnen Gitters bestimmt werden.

LEMMA 10.7. Sei $d, N \geq 1$, $s, \gamma > 0$ und eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ gegeben. Für $L \in \mathbb{N}$ besitzt die Indexmenge $\Phi_L(\vec{\sigma})$ aus Gleichung (10.3) asymptotisch

$$\#\Phi_L(\vec{\sigma}) \lesssim \gamma^{-dN} \cdot e^{4\sqrt{2L}} 2^{dL/s}$$

Elemente, wobei die Konstanten unabhängig von L und γ ist.

BEWEIS. Zum Beweis muss der zweite Teil des Beweises von Lemma 5.7 modifiziert werden. Wegen der Struktur der Menge $\Phi_L(\vec{\sigma})$ müssen dabei in Gleichung (5.10) auf Seite 43 nicht mehr alle Stufenindizes $\vec{\ell}$ mit $|\vec{\ell}|_1 = \ell$ gezählt werden, sondern nur noch solche, die innerhalb der Spingruppen I_+ und I_- monoton steigend geordnet sind. Somit muss

$$\#\Phi_L(\vec{\sigma}) \lesssim \sum_{\ell=0}^L 2^{d\ell/s} \cdot \#\{\vec{\ell} \in \mathbb{N}^N \mid |\vec{\ell}|_1 = \ell, \vec{\ell}|_{I_+} \text{ und } \vec{\ell}|_{I_-} \text{ monoton fallend}\}$$

berechnet werden. Die Anzahl der so geordneten Stufenindizes $\vec{\ell}$ kann aber mit Hilfe der Zerlegungszahl und Lemma 10.6 abgeschätzt werden. Es gilt insbesondere

$$|\vec{\ell}|_{I_\pm} \leq \ell$$

falls für die gesamte Folge $|\vec{\ell}|_1 = \ell$ gilt. Somit kann die Mächtigkeit durch

$$(e^{2\sqrt{2\ell}})^2 = e^{4\sqrt{2\ell}}$$

abgeschätzt werden. Summiert man anschließend auf, so folgt die Behauptung. \square

Mit Hilfe der Genauigkeitsabschätzung und der Abschätzung der Anzahl der Freiheitsgrade kann wiederum die Konvergenzrate abgeschätzt werden.

SATZ 10.8. Sei $d, N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$ und $s, \gamma > 0$ mit $m + s < \tau$, wobei τ die Schranke der Normäquivalenz ist. Weiterhin sei $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Für eine bezüglich $\vec{\sigma}$ partiell antisymmetrische Funktion $u \in H_{\text{mix}}^{s,m}((\mathbb{R}^d)^N, w_\gamma)$ existiert für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Linearkombination aus Funktionen $\{\mathcal{A}_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \nabla^N\}$, so dass $\|u - u_\varepsilon\|_m \leq \varepsilon \|u\|_{\text{mix}, w_\gamma, s, m}$ gilt. Dabei kann die Anzahl der Summanden in u_ε durch

$$(10.4) \quad \#u_\varepsilon \lesssim C_\gamma^{dNn_\varepsilon/(2s)} \gamma^{-dN} e^{4\sqrt{2}|\log_2 \varepsilon|} \varepsilon^{-d/s}$$

abgeschätzt werden, wobei n_ε wie in Satz 4.5 definiert ist. Die auftretende Konstante ist dabei unabhängig von ε und γ .

BEWEIS. Der Beweis wird analog zum Beweis des Satzes 5.8 geführt, wobei die Aussagen von Lemma 10.5 und Lemma 10.7 verwendet werden. \square

Stellt man wiederum nach der Anzahl der Unbekannten $n \sim e^{4\sqrt{2L}2^{dL/s}}$ um, so erhält man asymptotisch in n eine Genauigkeit von

$$\|u - u_n\|_m \lesssim e^{\frac{4s}{d}\sqrt{\frac{2s}{d}\log_2 n}} \cdot n^{-s/d}.$$

Im Vergleich zum Ergebnis aus Gleichung (5.12) tritt die Dimension N nicht mehr im Exponenten auf. Die Approximationsrate ist somit wirklich unabhängig von N und somit der Fluch der Dimensionen im Hinblick auf die Konvergenzrate gebrochen.

Das Resultat des letzten Satzes für partiell antisymmetrische Funktionen kann auf Grund von Satz 9.5 direkt auf die gebundenen Eigenzustände der Schrödingergleichung angewendet werden. Folgender Satz fasst das Hauptresultat dieses Kapitels zusammen.

KOROLLAR 10.9. Sei $N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration und $u \in H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$ eine Eigenfunktion zum Eigenwert λ mit $\lambda < \Sigma(\vec{\sigma})$. Wähle weiterhin Parameter $\gamma, \Omega \in \mathbb{R}$, so dass

$$\gamma < \sqrt{8(\Sigma(\vec{\sigma}) - \lambda)/N}, \quad \Omega \geq 12N^{3/2} + 12\gamma N^{1/2}$$

gilt und setze $\gamma' = \gamma/\Omega$. Mit v werde die nach Gleichung (9.2) skalierte Funktion bezeichnet. Wähle als Basis den Raum

$$\{\mathcal{A}_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}}(\Omega \cdot) \mid \vec{\lambda} \in \nabla^N\},$$

mit einer genügend regulären Waveletbasis, so dass für die Schranke τ der Normäquivalenz $1 + 1/2 < \tau$ gelte. Dann gibt es für jedes $\varepsilon > 0$ eine endliche Linearkombination aus diesen Funktionen, so dass $\|u - u_\varepsilon\|_1 \leq \varepsilon \|v\|_{\text{mix}, w_{\gamma'}, 1/2, 1}$ gilt. Dabei kann die Anzahl der Summanden in u_ε durch

$$(10.5) \quad \#u_\varepsilon \lesssim e^{\gamma' 3^{3/2} N n_\varepsilon} \gamma'^{-dN} e^{4\sqrt{2}|\log_2(\varepsilon/\Omega)|} \varepsilon^{-6}$$

abgeschätzt werden. Die auftretende Konstante ist dabei unabhängig von ε und γ .

BEWEIS. Aus Satz 9.5 folgt, dass die skalierte Funktion v in dem gewichteten Sobolevraum $H_{\text{mix}}^{1/2,1}((\mathbb{R}^3)^N, w_{\gamma'})$ gemischter Ordnung liegt. Damit kann für diese Funktion das Resultat von Satz 10.8 angewandt werden, wobei hier anstatt ε die kleinere Genauigkeit ε/Ω verwendet wird. Macht man nun die Umskalierung rückgängig, so folgt

$$\int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + \left|\frac{\vec{\omega}}{\Omega}\right|_2^2\right) |(\hat{u} - \hat{u}_\varepsilon)(\vec{\omega})|^2 d\vec{\omega} \leq (\varepsilon/\Omega)^2 \|v\|_{\text{mix}, w_{\gamma'}, 1/2, 1}^2$$

Für die gewöhnliche H^1 -Norm folgt damit

$$\|u - u_\varepsilon\|_1^2 \leq \Omega^2 \int_{\mathbb{R}^{3N}} \left(1 + \left|\frac{\vec{\omega}}{\Omega}\right|_2^2\right) |(\hat{u} - \hat{u}_\varepsilon)(\vec{\omega})|^2 d\vec{\omega} \leq \varepsilon^2 \|v\|_{\text{mix}, w_{\gamma'}, 1/2, 1}^2$$

und somit die Behauptung. \square

Umgestellt nach der Anzahl der Unbekannten ergibt sich daher eine Approximationsrate von

$$\|u - u_n\|_1 \lesssim e^{\sqrt{\frac{4}{27} \log_2 n}} \cdot n^{-1/6}$$

asymptotisch in n . Bis auf logarithmische Terme gilt, dass die Approximante bezüglich der H^1 -Norm wie $n^{-1/6}$ konvergiert, wenn n die Anzahl der Ansatzfunktionen ist.

Man sieht, dass die Anzahl der Teilchen N nicht mehr im Exponenten auftritt. Der Fluch der Dimensionen ist somit im Hinblick auf die Konvergenzrate gebrochen. Die angegebene Rate sollte aber als obere Abschätzung angesehen werden. Auf Grund der Struktur der Wellenfunktion kann erwartet werden, dass die Besov-Regularität der Wellenfunktionen entschieden höher liegt, siehe auch (Flad et al., 2007). Dies führt ebenfalls zu verbesserten Konvergenzraten.

Weiterhin deutet eine laufende Untersuchung (Kreusler, 2010) darauf hin, dass die Wellenfunktionen gebundener Zustände höhere Regularität besitzen. Ist zum Beispiel für ein $1/2 < s \leq 1$ der Ausdruck

$$(10.6) \quad \int_{\mathbb{R}^{3N}} (1 + |\vec{\omega}|_2^2) \left[\prod_{i=1}^N (1 + |\omega_i|_2^2) \right]^s |\widehat{w_{\gamma/2} v}(\omega)|^2 d\vec{\omega}$$

endlich, so verbessert sich ebenfalls die Approximationsrate, falls $1 + s < \tau$ gilt. Anstatt ε^{-6} Terme werden lediglich $\varepsilon^{-3/s}$ Terme in führender Ordnung benötigt um die Wellenfunktion bis auf den Fehler ε darzustellen. Die vorläufigen Ergebnisse deuten darauf hin, dass hier $s < 3/4$ gesetzt werden kann. Dies würde in führender Ordnung eine Approximationsrate der Wellenfunktionen von annähernd $n^{-1/4}$ und somit eine Rate von $n^{-1/2}$ bezüglich des Rayleighquotienten bedeuten, wobei hier n wiederum die Anzahl der Ansatzfunktionen ist.

Eine zu Satz 10.8 analoge Aussage kann ebenfalls für die dünnen Gitter mit fest gewähltem Diskretisierungsgebiet aus Kapitel 5, Abschnitt 4 gefunden werden. Folgender Satz fasst die Ergebnisse zusammen.

SATZ 10.10. *Mit den Voraussetzungen von Definition 10.3 und einem Parameter $R > 0$ definiere analog das antisymmetrisierte dünne Gitter aus den Räumen $\{V_{\ell,R}\}_{\ell \in \mathbb{N}}$ aus Definition 5.9*

$$G_{L,R}(\vec{\sigma}) = \{ \mathcal{A}_{\vec{\sigma}} \psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Theta_{L,R} \}.$$

Analog zu $\Phi_L(\vec{\sigma})$ aus Gleichung (10.3) definiere $\Theta_{L,R}(\vec{\sigma})$. Dann gilt

$$\#\Theta_{L,R}(\vec{\sigma}) \lesssim R^{dN} e^{4\sqrt{2L}} 2^{dL}$$

asymptotisch in L und R , wobei die Konstante nicht von γ abhängt. Die Konvergenzrate analog zu (10.4) verschlechtert sich bei geeigneter Wahl von R wie im Beweis zu Satz 5.13 auf

$$\#u_\varepsilon \lesssim e^{\gamma d^{3/2} N n_\varepsilon / (2s)} \gamma^{-dN} e^{4\sqrt{2|\log_2 \varepsilon|}} |\log \varepsilon|^{dN} \varepsilon^{-d/s},$$

wobei die Konstante unabhängig von ε und γ ist.

Wie schon im Falle von Kapitel 5 bleibt somit die Konvergenzrate führender Ordnung erhalten, der Fehler verhält sich asymptotisch in der Anzahl der Freiheitsgrade n wie $n^{-s/d}$. Jedoch tritt im Exponenten zum Term $|\log \varepsilon|$ wiederum die Anzahl der Dimensionen N auf, die Rate ist somit nicht unabhängig von N . Aussagen über die Approximation von Eigenfunktionen der Schrödingergleichung ergeben sich dabei analog zu Korollar 10.9.

Galerkindiskretisierung der Schrödingergleichung

In diesem Kapitel wird die Diskretisierung des Eigenwertproblems

$$H\psi = E\psi, \quad \psi \in H_{\vec{\sigma}}^2(\mathbb{R}^{3N})$$

auf partiell antisymmetrischen dünnen Gittern besprochen.

Zunächst wird auf dem Dünngitterraum $G_L(\vec{\sigma})$ eine Basis konstruiert. Dazu werden die partiell antisymmetrischen Basisfunktionen als Produkt zweier vollständig antisymmetrischer Funktionen dargestellt. Dabei sind die beiden Faktoren Slater-Determinanten, wie sie auch in der Quantenchemie verwendet werden, siehe z.B. (Helgaker et al., 2000). Auf diese Weise kann anschließend leicht eine Basis angegeben werden.

Verwendet man diese Funktionen in einem Galerkin-Verfahren, so müssen zur Bestimmung der Einträge der Diskretisierungsmatrix allgemein Integrale in $3N$ Variablen berechnet werden. Aufbauend auf den Condon-Slater-Regeln (Condon, 1930) wird die Bestimmung der Einträge auf maximal sechsdimensionale Integrale zurückgeführt. Dabei nehmen wir vereinfachend an, dass die Wavelets orthogonal sind. Für nicht-orthogonale Ansatzfunktionen können aufbauend auf den Löwdin-Regeln (Löwdin, 1955) ähnliche Ausdrücke gefunden werden.

Im Hinblick auf iterative Methoden zur Lösung des diskreten Eigenwertproblems wird gezeigt, dass Diagonalskalierung auch bei partiell antisymmetrischen Ansatzräumen auf eine stufenunabhängige Kondition der Diskretisierungsmatrix führt. Jedoch ist die Anwendung der Diskretisierungsmatrix auf einen Vektor der Flaschenhals bei der Berechnung von Näherungslösungen. Zum einen ist die Diskretisierungsmatrix annähernd voll besetzt und direkte Verfahren somit ineffizient. Zum anderen kann die die Konstruktion schneller Algorithmen zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts, siehe Kapitel 7, auf Grund der Antisymmetrie nicht auf den vorliegenden Fall übertragen werden.

1. Konstruktion einer Basis auf antisymmetrischen dünnen Gittern

In diesem Abschnitt wird eine Basis für den partiell antisymmetrisierten Dünngitterraum $G_L(\vec{\sigma})$ von Kapitel 5 konstruiert. Dabei wird folgende Struktur der Basisfunktionen ausgenutzt.

LEMMA 11.1. *Sei $N \geq 1$ und eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ der Struktur (8.8) gegeben. Weiterhin seien ψ_+ und ψ_- Funktionen in N_+ bzw. N_- Variablen. Dann gilt*

$$A_{\vec{\sigma}}(\psi_+ \otimes \psi_-) = (A\psi_+) \otimes (A\psi_-).$$

Damit ist $A_{\vec{\sigma}}(\psi_+ \otimes \psi_-)$ ein Produkt zweier antisymmetrischer Funktionen.

BEWEIS. Sei eine Permutation $P \in S_N$ mit $P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}$ gegeben. Dann lässt sich P als

$$P = P_+ \otimes P_-, \quad P_{\pm} \in S_{N_{\pm}}$$

schreiben. Damit gilt mit der Aufteilung $\vec{x} = [\vec{x}_+, \vec{x}_-]$ mit $\vec{x}_{\pm} \in \mathbb{R}^{3N_{\pm}}$

$$A_{\vec{\sigma}}(\psi_+ \otimes \psi_-)(\vec{x}) = \frac{1}{N_+!N_-!} \sum_{P_{\pm} \in S_{N_{\pm}}} \text{sign}(P_+) \psi_+(P_+ \vec{x}_+) \text{sign}(P_-) \psi_-(P_- \vec{x}_-).$$

Faktoriert man die Summen über P_{\pm} so ergibt sich die Behauptung. \square

Die Basisfunktionen des partiell antisymmetrisierten Gitters $G_{\vec{\sigma}}(L)$ lassen sich nun am einfachsten beschreiben, wenn die Basisfunktionen nummeriert werden. Definiere dazu die bijektive Abbildung

$$(11.1) \quad \kappa : \mathbb{N} \rightarrow \bigcup_{\ell=0}^{\infty} \phi_{\ell}$$

für die Indexmengen ϕ_{ℓ} , siehe Gleichung 5.4. Weiterhin sei für $\vec{K} = [\vec{k}, \vec{k}'] \in \mathbb{N}^N$ mit $\vec{k} \in \mathbb{N}^{N_+}$ und $\vec{k}' \in \mathbb{N}^{N_-}$ die partiell antisymmetrische Funktion

$$(11.2) \quad \Psi_{\vec{K}} = \Psi_{\vec{k}} \otimes \Psi_{\vec{k}'}, \quad \Psi_{\vec{k}} = \sqrt{N_+!} A \bigotimes_{i=1}^{N_+} \psi_{\kappa(k_i)}, \quad \Psi_{\vec{k}'} = \sqrt{N_-!} A \bigotimes_{i'=1}^{N_-} \psi_{\kappa(k'_{i'})}$$

gegeben. Der Faktoren $\sqrt{N_{\pm}!}$ führen dabei auf eine normierte Wellenfunktion, wenn alle Faktoren $\psi_{\kappa(k_i)}$, $i = 1, \dots, N_+$, und $\psi_{\kappa(k'_{i'})}$, $i' = 1, \dots, N_-$, normiert sind. In der Quantenchemie werden die Funktionen $\Psi_{\vec{k}}$ und $\Psi_{\vec{k}'}$ üblicherweise Slater-Determinanten genannt und die einzelnen Faktoren Orbitale, siehe z.B. (Helgaker et al., 2000).

Sei nun ein Waveletindex $\vec{\lambda} \in \Phi_L$ gegeben. Setzt man nun

$$\vec{k} = [\kappa^{-1}(\lambda_1), \dots, \kappa^{-1}(\lambda_{N_+})], \quad \vec{k}' = [\kappa^{-1}(\lambda_{N_++1}), \dots, \kappa^{-1}(\lambda_N)]$$

bzw. abkürzend $\vec{K} = [\vec{k}, \vec{k}'] = \kappa^{-1}(\vec{\lambda})$, so gilt

$$A_{\vec{\sigma}} \psi_{\vec{\lambda}} = \frac{1}{\sqrt{N_+! N_-!}} \Psi_{\vec{K}}, \quad \vec{K} = \kappa^{-1}(\vec{\lambda}).$$

Mit Hilfe dieser Notation kann nun leicht folgende Aussage gezeigt werden.

SATZ 11.2. *Sei $N \geq 1$, $L \in \mathbb{N}$ und $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Dann ist durch*

$$\{\Psi_{\vec{K}} \mid \vec{K} \in \mathcal{J}_{\vec{\sigma}}(L)\}$$

mit

$$\mathcal{J}_{\vec{\sigma}}(L) = \{[\vec{k}, \vec{k}'] \mid [\vec{k}, \vec{k}'] = \kappa^{-1}(\vec{\lambda}), \vec{k}, \vec{k}' \text{ streng monoton fallend, } \vec{\lambda} \in \Phi_L\}$$

eine Basis von $G_{\vec{\sigma}}(L)$ gegeben.

BEWEIS. Für eine antisymmetrische Funktion $\Psi_{\vec{k}}$ mit $\vec{k} \in \mathbb{N}^{N_+}$ gilt

$$\Psi_{P\vec{k}} = \text{sign}(P) \Psi_{\vec{k}}$$

für alle Permutationen $P \in S_{N_+}$. Daraus folgt für die Konstruktion einer Basis, dass man sich auf streng monoton fallende Vektoren \vec{k} beschränken kann. Eine analoge Aussage gilt ebenfalls für $\Psi_{\vec{k}'}$. Die lineare Unabhängigkeit der angegebenen Menge folgt schließlich aus der linearen Unabhängigkeit der Funktionen $\{\psi_{\vec{\lambda}}, \vec{\lambda} \in \nabla^N\}$. \square

Aus dem letzten Satz folgt ebenfalls, dass der Raum aller bezüglich $\vec{\sigma}$ partiell antisymmetrischen Funktionen durch $\{\Psi_{\vec{K}} \mid \vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})\}$ mit

$$(11.3) \quad \mathcal{I}(\vec{\sigma}) = \{[\vec{k}, \vec{k}'] \mid \vec{k} \in \mathbb{N}^{N_+}, \vec{k}' \in \mathbb{N}^{N_-}, \vec{k}, \vec{k}' \text{ streng monoton fallend}\}$$

aufgespannt ist.

2. Berechnung der Matrixelemente

Die Einträge der Galerkinmatrix zur Diskretisierung des Hamiltonoperators sind durch $3N$ -dimensionale Integrale gegeben, wobei neben der Hochdimensionalität als weitere Schwierigkeit die partielle Antisymmetrie auftritt. Durch die spezielle Struktur des Hamiltonoperators kann die Berechnung der Matrixelemente jedoch stark vereinfacht werden. Grundlage hierfür sind die sogenannten Condon-Slater-Regeln (Condon, 1930), bzw. Verallgemeinerungen davon (Löwdin, 1955).

Durch diese Regeln kann die Berechnung der Einträge auf drei- bzw. sechsdimensionale Integrale zurückgeführt werden. In der ursprünglichen Arbeit von Condon (Condon, 1930) muss dabei vorausgesetzt werden, dass die Orbitale in den Ansatzfunktionen orthogonal sind, jedoch kann auf diese Annahme auch verzichtet werden (Löwdin, 1955).

In diesem Abschnitt werden diese Regeln im Falle partiell antisymmetrischer Funktionen angegeben. Dabei beschränken wir uns der Einfachheit halber auf den Fall orthogonaler Funktionen. Im allgemeinen Fall kann man die Berechnung der Matrixelemente ebenfalls auf maximal sechsdimensionale Integrale zurückführen.

Um diese Regeln auf eine Diskretisierung mit Wavelets anzuwenden, müssen demnach orthogonale Basen gewählt werden. Dafür können zum Beispiel die Daubechies-Wavelets (Daubechies, 1988) verwendet werden. Weiterhin existieren auch stückweise polynomiale und orthogonale Multiwavelets mit beschränktem Träger (Donovan et al., 1996). Die Approximationsresultate dieser Arbeit sind auch für letztere Wavelets gültig.

Ziel ist es demnach die Einträge der Diskretisierungsmatrix des Hamiltonoperators H aus Gleichung (8.4) für die Ansatzfunktionen $\{\Psi_{\vec{K}} \mid \vec{K} \in \mathcal{J}\}$ für eine Teilmenge $\mathcal{J} \subset \mathcal{I}(\vec{\sigma})$ zu berechnen. Die Einträge sind dabei durch

$$\langle \vec{k}, \vec{k}' \mid H \mid \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle := \langle \Psi_{[\vec{k}, \vec{k}']}, H \Psi_{[\vec{\ell}, \vec{\ell}']} \rangle$$

gegeben, wobei $[\vec{k}, \vec{k}'], [\vec{\ell}, \vec{\ell}'] \in \mathcal{J}$ gelte.

Der Operator H kann als Summe von Operatoren der Form

$$O_1 = \sum_{i=1}^N h_1(i), \quad O_2 = \sum_{1 \leq i < j \leq N} h_2(i, j),$$

dargestellt werden. Dabei setzt sich O_1 aus den Einteilchenoperatoren der kinetischen Energie und der Kern-Elektronen Wechselwirkung, d.h.

$$h_1 = -\frac{1}{2}\Delta + \sum_{\nu=1}^M \frac{Z_\nu}{|\mathbf{x} - \mathbf{a}_\nu|_2},$$

zusammen, wobei Δ den Laplaceoperator in drei Dimensionen bezeichnet. Mit $h_1(i)$ wird nun der entsprechende Operator bezeichnet, der auf die Koordinate \mathbf{x}_i wirkt. Der Operator O_2 gibt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung wieder, wobei

$$h_2 = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}$$

gilt und bei $h_2(i, j)$ die Koordinaten \mathbf{x} und \mathbf{y} durch \mathbf{x}_i bzw. \mathbf{x}_j zu ersetzen sind.

Es wird sich zeigen, dass sich die Matrixelemente

$$\langle \vec{k}, \vec{k}' \mid O_{1/2} \mid \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle := \langle \Psi_{[\vec{k}, \vec{k}']}, O_{1/2} \Psi_{[\vec{\ell}, \vec{\ell}']} \rangle$$

von $O_{1/2}$ bezüglich der Basis $\{\Psi_{[\vec{k}, \vec{k}']} \mid [\vec{k}, \vec{k}'] \in \mathcal{J}\}$ durch gewisse Regeln auf die Einträge der Galerkinmatrix von h_1 bzw. h_2 zurückführen lassen. Grundlage dafür ist, dass die Operatoren auf höchstens zwei Koordinaten wirken. Das Integral über die anderen Koordinaten kann auf Grund der Orthogonalität der Faktoren vereinfacht werden.

$\sum_{i=1}^{N_+} \langle k_i \mathbf{h}_1 k_i \rangle + \sum_{i'=1}^{N_-} \langle k'_{i'} \mathbf{h}_1 k'_{i'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots k_{\nu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots k'_{\nu'} \dots k'_{N_-}]$
$\langle k_{\nu} \mathbf{h}_1 \ell_{\nu} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots \ell_{\nu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots k'_{\nu'} \dots k'_{N_-}]$
$\langle k'_{\nu'} \mathbf{h}_1 \ell'_{\nu'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots k_{\nu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots \ell'_{\nu'} \dots k'_{N_-}]$

TABELLE 1. Condon-Slater Regeln zur Berechnung des Matrixelements $\langle \vec{k}, \vec{k}' | \mathbf{O}_1 | \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle$ bei bezüglich $L^2(\mathbb{R}^3)$ orthonormalen Ansatzfunktionen. Dabei wird angenommen, dass sowohl \vec{k} und $\vec{\ell}$ als auch \vec{k}' und $\vec{\ell}'$ in größtmöglicher Übereinstimmung sind. Zusätzlich gelte $k_{\nu} \neq \ell_{\nu}$ und $k'_{\nu'} \neq \ell'_{\nu'}$. Alle nicht angegebenen Fälle ergeben Null.

Zur Formulierung dieser Aussagen benötigen wir noch folgende Notation. Für die Matrixelemente von $\mathbf{h}_{1,2}$ gelten folgende Schreibweisen:

$$\begin{aligned} \langle k | \mathbf{h}_1 | \ell \rangle &:= \langle \psi_k, \mathbf{h}_1 \psi_{\ell} \rangle, \\ \langle k_1 k_2 | \mathbf{h}_2 | \ell_1 \ell_2 \rangle &:= \langle \psi_{k_1} \otimes \psi_{k_2}, \mathbf{h}_2 \psi_{\ell_1} \otimes \psi_{\ell_2} \rangle \\ \langle k_1 k_2 | | \ell_1 \ell_2 \rangle &:= \langle k_1 k_2 | \mathbf{h}_2 | \ell_1 \ell_2 \rangle - \langle k_1 k_2 | \mathbf{h}_2 | \ell_2 \ell_1 \rangle. \end{aligned}$$

Die Regeln zur Berechnung der Matrixelemente werden stark vereinfacht, wenn man die Indizes \vec{k}, \vec{k}' , bzw. $\vec{\ell}, \vec{\ell}'$ geeignet umsortiert.

DEFINITION 11.3. Sei $N \geq 1$ und eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ gegeben. Weiterhin seien zwei Indizes $\vec{K} = [\vec{k}, \vec{k}']$ und $\vec{L} = [\vec{\ell}, \vec{\ell}']$ gegeben, wobei

$$\vec{k}, \vec{\ell} \in \mathbb{N}^{N_+}, \quad \vec{k}', \vec{\ell}' \in \mathbb{N}^{N_-}$$

gelte. Die einzelnen Komponenten von $\vec{k}, \vec{k}', \vec{\ell}$ und $\vec{\ell}'$ seien jeweils paarweise verschieden. Die Komponenten \vec{k} und $\vec{\ell}$ sind in *maximaler Übereinstimmung*, wenn jede Permutation P die Anzahl der identischen Komponenten in \vec{k} und $P\vec{\ell}$ nicht vergrößert (analog für \vec{k}' und $\vec{\ell}'$). Die gesamten Indizes \vec{K} und \vec{L} sind in maximaler Übereinstimmung, falls jede ihrer Komponenten in maximaler Übereinstimmung ist.

Mit Hilfe dieser Bezeichnungen können Regeln zur Berechnung der Matrixelemente angegeben werden.,

SATZ 11.4 (**Condon-Slater-Regeln**). Sei $N \geq 1$ und $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Weiterhin sei durch $\psi_0, \psi_1, \dots \in H^1(\mathbb{R}^3)$ ein System orthonormaler Ansatzfunktionen gegeben. Seien zwei Indizes $[\vec{k}, \vec{k}'], [\vec{\ell}, \vec{\ell}']$ gegeben, die in maximaler Übereinstimmung sind. Dann können die Matrixelemente

$$\langle \Psi_{[\vec{k}, \vec{k}']} | \mathbf{O}_{1/2} | \Psi_{[\vec{\ell}, \vec{\ell}']} \rangle$$

gemäß den Tabellen 1 und 2 berechnet werden. Das Matrixelement zwischen allgemeinen Indizes \vec{K} und \vec{L} können dabei auf diesen Fall zurückgeführt werden, wenn entsprechend permutiert wird. Dabei ändert sich höchstens das Vorzeichen.

BEWEIS. Ein großer Teil der Regeln kann direkt auf die Condon-Slater-Regeln für vollständig antisymmetrische Funktionen zurückgeführt werden. Dies ergibt sich aus der

$\sum_{1 \leq i < j \leq N_+} \langle k_i k_j k_i k_j \rangle + \sum_{1 \leq i' < j' \leq N_-} \langle k'_{i'} k'_{j'} k'_{i'} k'_{j'} \rangle$ $+ \sum_{i=1}^{N_+} \sum_{i'=1}^{N_-} \langle k_i k'_{i'} h_2 k_i k'_{i'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots k_{\nu} \dots k_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots k'_{\nu'} \dots k'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$
$\sum_{i=1}^{N_+} \langle k_{\nu} k_i \ell_{\nu} k_i \rangle + \sum_{i'=1}^{N_-} \langle k_{\nu} k'_{i'} h_2 \ell_{\nu} k'_{i'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots \ell_{\nu} \dots k_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots k'_{\nu'} \dots k'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$
$\sum_{i'=1}^{N_-} \langle k'_{\nu'} k'_{i'} \ell'_{\nu'} k'_{i'} \rangle + \sum_{i=1}^{N_+} \langle k_i k'_{\nu'} h_2 k_i \ell'_{\nu'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots k_{\nu} \dots k_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots \ell'_{\nu'} \dots k'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$
$\langle k_{\nu} k_{\mu} \ell_{\nu} \ell_{\mu} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots \ell_{\nu} \dots \ell_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots k'_{\nu'} \dots k'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$
$\langle k'_{\nu'} k'_{\mu'} \ell'_{\nu'} \ell'_{\mu'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots k_{\nu} \dots k_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots \ell'_{\nu'} \dots \ell'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$
$\langle k_{\nu} k'_{\nu'} h_2 \ell_{\nu} \ell'_{\nu'} \rangle$	$\vec{\ell} = [k_1 \dots \ell_{\nu} \dots k_{\mu} \dots k_{N_+}]$ $\vec{\ell}' = [k'_1 \dots \ell'_{\nu'} \dots k'_{\mu'} \dots k'_{N_-}]$

TABELLE 2. Condon-Slater Regeln zur Berechnung des Matrixelements $\langle \vec{k}, \vec{k}' | O_2 | \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle$ bei bezüglich L^2 orthonormalen Ansatzfunktionen. Dabei wird angenommen, dass sowohl \vec{k} und $\vec{\ell}$ als auch \vec{k}' und $\vec{\ell}'$ in größtmöglicher Übereinstimmung sind. Zusätzlich gelte $k_i \neq \ell_i$, $i = \nu, \mu$, und $k'_{i'} \neq \ell'_{i'}$, $i' = \mu', \nu'$. Alle nicht angegebenen Fälle ergeben Null.

Zerlegung der Operatoren $O_{1/2}$ in

$$O_1 = \left(\sum_{i=1}^{N_+} h_1(i) \right) \otimes \text{Id} + \text{Id} \otimes \left(\sum_{i=1}^{N_-} h_1(i) \right),$$

$$O_2 = \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N_+} h_2(i, j) \right) \otimes \text{Id} + \text{Id} \otimes \left(\sum_{1 \leq i < j \leq N_-} h_2(i, j) \right)$$

$$+ \sum_{i=1}^{N_+} \sum_{j=1}^{N_-} h_2(i, j + N_+),$$

das heißt als Summe von Tensorproduktoperatoren. Für einen Operator der Form $O \otimes \text{Id}$ gilt jedoch

$$\langle \Psi_{[\vec{k}, \vec{k}']} | (O \otimes \text{Id}) \Psi_{[\vec{\ell}, \vec{\ell}']} \rangle = \langle \Psi_{\vec{k}}, O \Psi_{\vec{k}'} \rangle \cdot \delta_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'}$$

durch die Orthonormalität der Ansatzfunktionen. Eine analoge Aussage gilt auch für einen Operator $\text{Id} \otimes O$. Die einzelnen Faktoren $\Psi_{\vec{k}}, \Psi_{\vec{k}'}$ sind nach Definition vollständig antisymmetrisch. Daher können direkt die Condon-Slater-Regeln angewendet werden, siehe zum Beispiel (Szabo und Ostlund, 1989).

Nun muss nur noch jener Teil des Elektron-Elektron-Operators betrachtet werden, der die beiden Spingruppen koppelt. Die Herleitung der entsprechenden Regeln orientiert sich dabei an (Szabo und Ostlund, 1989). Wegen der Symmetrie gilt

$$\langle \vec{k}, \vec{k}' | \sum_{i=1}^{N_+} \sum_{i'=1}^{N_-} h_2(i, N_+ + i') | \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle = N_+ N_- \cdot \langle \vec{k}, \vec{k}' | h_2(1, N_+ + 1) | \vec{\ell}, \vec{\ell}' \rangle,$$

da jeder Operator der Summe den gleichen Anteil liefert. Setzt man nun explizit die Definition der partiell antisymmetrischen Funktionen ein, so erhält man für den letzten Faktor

$$\frac{1}{(N_+ - 1)!(N_- - 1)!} \sum_{P, Q \in S_{N_+}} \sum_{P', Q' \in S_{N_-}} \text{sign}(P) \text{sign}(Q) \text{sign}(P') \text{sign}(Q') \\ \times \int \psi_{\vec{k}}(P\vec{x}_+) \psi_{\vec{k}'}(P'\vec{x}_-) \frac{1}{|\mathbf{x}_{+,1} - \mathbf{x}_{-,1}|^2} \psi_{\vec{\ell}}(Q\vec{x}_+) \psi_{\vec{\ell}'}(Q'\vec{x}_-) d\vec{x}_+ d\vec{x}_-$$

mit Hilfe der Aufteilung $\vec{x} = [\vec{x}_+, \vec{x}_-]$ gemäß den Spingruppen. Die Integrale über die Variablen $\mathbf{x}_{+,2}, \dots, \mathbf{x}_{+,N_+}$ und $\mathbf{x}_{-,2}, \dots, \mathbf{x}_{-,N_-}$ können mit Hilfe des Satzes von Fubini herausgezogen werden. Wegen der Orthonormalität der Orbitale erhält man so für das Integral

$$\prod_{i=2}^{N_+} \delta_{k_{P(i)}, \ell_{Q(i)}} \cdot \prod_{i'=2}^{N_-} \delta_{k'_{P'(i')}, \ell'_{Q'(i')}} \times \\ \times \int \psi_{k_{P(1)}}(\mathbf{x}) \psi_{k'_{P'(1)}}(\mathbf{y}) \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \psi_{\ell_{Q(1)}}(\mathbf{x}) \psi_{\ell'_{Q'(1)}}(\mathbf{y}) d\mathbf{x} d\mathbf{y}.$$

Im Folgenden werden fünf Fälle unterschieden.

Für den ersten gelte $\vec{\ell} = \vec{k}$ und $\vec{\ell}' = \vec{k}'$, das heißt die Indizes stimmen vollständig überein. Damit müssen die Permutationen in den Stellen $i = 2, \dots, N_+$ bzw. $i' = 2, \dots, N_-$ übereinstimmen, es gilt somit $P = Q$ und $P' = Q'$. Zudem wird jedes Paar von Orbitalen $(k_i, k'_{i'})$ genau $(N_+ - 1)! \cdot (N_- - 1)!$ -mal an die erste Stelle permutiert. Dies ergibt den letzten Beitrag in der ersten Zeile von Tabelle 2.

Im zweiten Fall seien die Indizes $\vec{\ell}$ und \vec{k} an der Stelle ν unterschiedlich ($\ell_\nu \neq k_\nu$), während $\vec{\ell}' = \vec{k}'$ gelte. Dann muss

$$P(1) = Q(1) = \nu \quad \text{und} \quad P(i) = Q(i) \quad \text{für} \quad i = 2, \dots, N_+$$

gelten. Weiterhin müssen die Permutationen P' und Q' analog zum ersten Fall übereinstimmen. Insgesamt tritt für $i' = 1, \dots, N_-$ jedes Paar $(k_\nu, k'_{i'})$ und $(\ell_\nu, k'_{i'})$ genau $(N_+ - 1)! \cdot (N_- - 1)!$ mal auf. Daraus ergibt sich der zweite Summand der zweiten Zeile von Tabelle 2. Analog kann auch der dritte Fall behandelt werden, für den $\vec{\ell}'$ und \vec{k}' sich an der Stelle ν' unterscheiden, während $\vec{\ell} = \vec{k}$ gilt (zweiter Summand der dritten Zeile).

Im vierten Fall seien die Indizes $\vec{\ell}$ und \vec{k} an der ν -ten Stelle und die Indizes $\vec{\ell}'$ und \vec{k}' an der ν' -ten Stelle unterschiedlich. Dadurch muss für die Permutationen

$$P(1) = Q(1) = \nu \quad \text{und} \quad P(i) = Q(i) \quad \text{für} \quad i = 2, \dots, N_+ \\ P'(1) = Q'(1) = \nu' \quad \text{und} \quad P'(i) = Q'(i) \quad \text{für} \quad i = 2, \dots, N_-$$

gelten. Mit der gleichen Argumentation wie oben folgt der Ausdruck in der letzten Zeile der Tabelle.

Unterschieden sich die Indizes $\vec{\ell}$ und \vec{k} bzw. $\vec{\ell}'$ und \vec{k}' in mehr als einer Stelle so ergibt sich kein Beitrag. \square

Kennt man die Diskretisierungsmatrizen

$$h_1 := [\langle \psi_i, \mathbf{h}_1 \psi_{i'} \rangle]_{i,i'}, \quad \text{und} \quad h_2 := [\langle \psi_i \otimes \psi_j, \mathbf{h}_2 \psi_{i'} \otimes \psi_{j'} \rangle]_{i,i',j,j'}$$

für alle vorkommenden Indizes i, i', j, j' , so lassen sich die Einträge der Diskretisierungsmatrizen von $O_{1/2}$ und damit auch vom Hamiltonoperator H direkt berechnen.

3. Präkonditionierung

Möchte man nun das diskretisierte Eigenwertproblem des Hamiltonoperators mit den Methoden von Kapitel 11, Abschnitt 3 effizient lösen, benötigt man einen Präkonditionierer. Analog zum Fall ohne Antisymmetrie, vergleiche Kapitel 11, Abschnitt 2, führt die Normäquivalenz der gewichteten Waveletkoeffizienten auf einen einfachen Präkonditionierer mit einer stufenunabhängigen Kondition.

Sei $\{\Psi_{\vec{K}} \mid \vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})\}$ die Menge der bezüglich der Spinkonfiguration $\vec{\sigma}$ partiell antisymmetrischer Basisfunktionen, siehe Gleichung (11.2) und (11.3). Weiterhin sei mit Hilfe der Nummerierung κ von Gleichung (11.1) die Abbildung der Stufen

$$\vec{j}(\vec{K}) = [j(\kappa(K_1)), \dots, j(\kappa(K_N))]$$

analog zu Gleichung (4.11) gegeben.

LEMMA 11.5. Sei $N \geq 1$, $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration und $\vec{t} \in \mathbb{R}^N$ mit $0 \leq \vec{t} < \tau$ komponentenweise, wobei τ die Ordnung der Normäquivalenz angibt. Dann gilt die Normäquivalenz

$$(11.4) \quad \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} \left[\frac{1}{N_+! N_-!} \sum_{P: P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}} 2^{2\langle \vec{t}, \vec{j}(P\vec{K}) \rangle} \right] |c_{\vec{K}}|^2 \sim \left\| \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} c_{\vec{K}} \Psi_{\vec{K}} \right\|_{H^{\vec{t}}(\mathbb{R}^3)^N}^2.$$

Die Räume $H^{\vec{t}}(\mathbb{R}^d)^N$ sind dabei in Korollar 3.7 definiert.

BEWEIS. Zum Beweis der Aussage wird der partiell antisymmetrische Fall auf den ohne Symmetrie von Lemma 4.3 zurück gespielt. Mit der Definition der partiell antisymmetrischen Basisfunktionen $\Psi_{\vec{k}}$ gilt

$$\sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} c_{\vec{K}} \Psi_{\vec{K}} = \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}_{\vec{\sigma}}} \frac{1}{\sqrt{N_+! N_-!}} \sum_{P: P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}} \text{sign}(P) c_{\vec{K}} \Psi_{P\vec{K}}.$$

Die Indizes

$$\{P\vec{K} \mid \vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma}), P: P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}\}$$

sind dabei paarweise verschieden. Damit kann Lemma 4.3 angewendet werden und die Behauptung folgt. \square

Speziell kann damit analog zu Satz 4.4 durch die Darstellung der Sobolevräume durch Schnitte von Tensorprodukträumen, vergleiche Korollar 3.7, die Normäquivalenz zu diesen Räumen gezeigt werden. Wir beschränken uns hierbei auf den Fall isotroper Regularität.

SATZ 11.6. Sei $N \geq 1$, $m \in \mathbb{N}$, so dass $m < \tau$ gilt, wobei τ die obere Schranke der Normäquivalenz ist. Weiterhin sei $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ eine Spinkonfiguration. Dann gilt die Normäquivalenz

$$\sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} 2^{2m \cdot |\vec{j}(\vec{K})|_{\infty}} |c_{\vec{K}}|^2 \sim \left\| \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} c_{\vec{K}} \Psi_{\vec{K}} \right\|_m^2.$$

BEWEIS. Nach Definition der isotropen Sobolevräume als Schnitte von Tensorprodukträumen ergibt sich analog zum Satz 4.4

$$\left\| \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} c_{\vec{K}} \Psi_{\vec{K}} \right\|_m^2 \sim \sum_{i=1}^N \sum_{\vec{K} \in \mathcal{I}(\vec{\sigma})} \frac{1}{N_+! N_-!} \sum_{P: P\vec{\sigma} = \vec{\sigma}} 2^{2\langle m\vec{e}_i, \vec{j}(P\vec{K}) \rangle} |c_{\vec{K}}|^2.$$

Für den Exponenten gilt

$$\langle \vec{e}_i, \vec{j}(P\vec{K}) \rangle = j(\kappa(K_{P^{-1}(i)})).$$

Die Summe über $i = 1, \dots, N$ liefert somit

$$\sum_{i=1}^N 2^{2m\langle \vec{e}_i, \vec{j}(P\vec{K}) \rangle} = \sum_{i=1}^N 2^{2mj(\kappa(K_i))} \sim 2^{2m|j(\vec{K})|_\infty}.$$

Die anschließende Summe über die $N_+!N_-!$ Permutationen liefert die Behauptung. \square

Der letzte Satz zeigt, dass die partiell antisymmetrischen Ansatzfunktionen $\Psi_{\vec{K}}$ die gleiche Normäquivalenz erfüllen, wie die tensorierten Wavelets in Satz 4.4. Damit kann der gleiche diagonale Präkonditionierer wie in Kapitel 6, Abschnitt 2 angewandt werden. Dieser liefert eine stufenunabhängige Kondition.

4. Komplexität der Diskretisierungsmatrix

In diesem Abschnitt wird näherungsweise die Anzahl der Einträge der Diskretisierungsmatrix des Hamiltonoperators H bezüglich partiell antisymmetrisierter dünne Gitter bestimmt. Als Modell dient dabei das dünne Gitter aus Satz 10.10, bei dem das Gebiet explizit durch einen Parameter R beschränkt wird.

Wir beginnen mit der Abschätzung der Anzahl der Einträge je Zeile. Sei dazu für eine Spinkonfiguration $\vec{\sigma} \in \mathcal{R}_N$ gegeben. Wir betrachten für $L \in \mathbb{N}$ und festes $R > 0$ das partiell antisymmetrisierte dünne Gitter

$$G_{L,R}(\vec{\sigma}) = \text{span}\{A_{\vec{\sigma}}\psi_{\vec{\lambda}} \mid \vec{\lambda} \in \Phi_{L,R}\},$$

vergleiche auch Kapitel 5, Abschnitt 4, Kapitel 10, Abschnitt 2, sowie speziell Satz 10.10. Für diesen Raum sei analog zum Abschnitt 1 eine Indexmenge $\mathcal{J}_{L,R}(\vec{\sigma})$ gegeben, so dass die Funktionen $\{\Psi_{\vec{K}} \mid \vec{K} \in \mathcal{J}_{L,R}(\vec{\sigma})\}$ den Dünngitterraum aufspannen.

Wir beginnen mit der Abschätzung der Anzahl der Einträge in einer Zeile. Sei dazu eine Ansatzfunktion $\Psi_{\vec{K}}$ mit Parameter $\vec{K} = [\vec{k}, \vec{k}'] \in \mathcal{J}$ gegeben. Mit Hilfe der Nummerierung κ , siehe Gleichung (11.1), entspricht dies einem Index

$$\vec{\lambda} = (\lambda_1, \dots, \lambda_{N_+}, \lambda_{N_++1}, \dots, \lambda_N), \quad \lambda_i = \kappa(K_i).$$

Wie schon in den vorangegangenen Abschnitten nehmen wir an, dass die einzelnen Funktionen $\psi_{\vec{\lambda}}$ orthonormal sind. Dann folgt aus den Condon-Slater-Regeln, Satz 11.4, dass ein Matrixelement $\langle \vec{K} | H | \vec{L} \rangle$ nur dann nicht verschwindet, wenn maximal zwei Indizes von \vec{K} und \vec{L} nicht übereinstimmen.

Um diese Anzahl abzuschätzen wählen wir ein Paar $i < j$ und ersetzen die Basisfunktionen mit Index λ_i, λ_j durch solche mit λ'_i, λ'_j . Die so entstehende Funktion muss jedoch weiterhin ein Element des Dünngitterraumes sein. Demnach muss

$$|\lambda'_i| + |\lambda'_j| \leq L - |\vec{j}(\vec{\lambda})|_1 + |\lambda_i| + |\lambda_j| =: L_{ij}$$

gelten, sowie die entsprechenden Funktionen ebenfalls im Gebiet liegen, das durch den Parameter R bestimmt wird. Das Paar liegt demnach in dem zweidimensionalen Dünngitterraum $G_{L_{ij},R}$. Nach Lemma 5.12 existieren somit $R^6 L_{ij} 2^{3L_{ij}}$ Funktionen asymptotisch in L und R . Schätzt man L_{ij} durch die Stufe L ab und berücksichtigt die Anzahl der Elemente im Dünngitterraum, siehe Satz 10.10, so ergeben sich maximal

$$R^{3N+6} e^{4\sqrt{2}L} L 2^{6L}$$

Einträge. Dies ist in etwa die quadratische Anzahl der Basisfunktionen.

Somit wird die Berechnung der Matrixeinträge sowie die Matrix-Vektor-Multiplikation die Komplexität der Berechnung der Galerkinlösung bestimmen. Wünschenswert wäre hier ein Algorithmus, der auf die Aufstellung der Matrix verzichtet. Für direkte CI-Methoden (Roos, 1972) kann solch ein Algorithmus angegeben werden, der die Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts auf die Ein- und Zweiteilchenmatrixelemente zurückführt, siehe auch (Helgaker et al., 2000, Abschnitt 11.8).

Die entsprechenden Algorithmen können jedoch nicht sofort auf den vorliegenden Fall übertragen werden. Die Komplexität der dort vorgestellten Algorithmen ist zwar linear in der Anzahl der Basisfunktionen der Gesamttraumes, jedoch quadratisch in der Anzahl der Orbitale. Bei den üblicherweise verwendeten Ansatzfunktionen in der Quantenchemie ist die Anzahl der Orbitale im Vergleich zur Anzahl der Slater-Determinanten vernachlässigbar. In unserem sind auf Grund der Dünngitterkonstruktion gilt dies nicht mehr; vielmehr stimmen die Größenordnung der beiden Zahlen überein. Die Algorithmen müssen daher in dieser Hinsicht überarbeitet werden.

Teil 3

Numerische Experimente

Approximation des Newtonpotentials

In den folgenden beiden Kapiteln wird das Heliumatom auf adaptiv gewählten dünnen Gittern diskretisiert. Obwohl Helium nur zwei Elektronen besitzt und damit das erste nichttriviale elektronische System darstellt, treten jedoch schon dort im Wesentlichen die gleichen Schwierigkeiten auf, wie bei Atomen und Molekülen mit mehreren Elektronen. Dies folgt aus der Tatsache, dass die Konvergenzrate nach den Ergebnissen der letzten Kapitel unabhängig von der Anzahl der Elektronen ist. Lediglich die Antisymmetrie muss bei Helium nicht beachtet werden, da im Grundzustand beide Elektronen den gleichen Spin besitzen.

Bei der Berechnung der Einträge der Diskretisierungsmatrizen h_1 und h_2 müssen drei- bzw. sechsdimensionale Integrale über singuläre Potentiale berechnet werden. Weiterhin können die in Kapitel 7 vorgestellten effizienten Algorithmen zur Berechnung der Matrix-Vektor-Multiplikation nicht direkt angewendet werden, da die Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht als Tensorprodukt geschrieben werden kann.

In diesem Kapitel wird daher eine Approximation des Newtonpotentials konstruiert und der entsprechende Fehler abgeschätzt. Dabei wird das Newtonpotential $1/|\cdot|_2$ durch eine kurze Summe von Tensorproduktfunktionen ohne Singularität genähert. Speziell werden hier Exponentialsummen gewählt, wie sie auch in (Beylkin und Mohlenkamp, 2004; Hackbusch, 2006) verwendet werden.

Daraus folgt, dass die zugehörigen Multiplikationsoperatoren sich näherungsweise ebenfalls als eine Summe von Tensorproduktoperatoren schreiben lassen: jeder einzelne Summand zerfällt im Falle des Kernpotentials vollständig in ein Tensorprodukt von Operatoren, die auf eine Variable wirken. Bedingt durch die Struktur $1/|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2$ zerfallen die einzelnen Summanden der Elektron-Elektron-Wechselwirkung nur in ein Produkt von drei Operatoren, die auf jeweils zwei Variablen (x_i und y_i) wirken. Im nächsten Kapitel wird gezeigt, wie der Algorithmus von Schwab und Todor, siehe Kapitel 7, Abschnitt 3, angewendet werden kann.

im Folgenden wird zuerst in Abschnitt 1 allgemein diskutiert, welche Auswirkung eine Störung des Newtonpotentials auf das Spektrum besitzt. Anschließend wird im zweiten Abschnitt die Approximation mit Hilfe von Exponentialsummen besprochen.

1. Störung des Potentials

Der Hamiltonoperator H aus Gleichung (8.4) eines allgemeinen elektronischen N -Teilchen-Systems kann in zwei Teile zerlegt werden:

$$H = T + V,$$

wobei $T = -\frac{1}{2}\Delta$ die kinetische Energie und V das Potential darstellt. Das Potential selbst setzt sich wiederum aus der Elektron-Kern- (V_{ne}) sowie der Elektron-Elektron-Wechselwirkung (V_{ee}) zusammen. Beide Operatoren sind Multiplikationsoperatoren bezüglich der Funktionen

$$V_{ne} = - \sum_{i=1}^N \sum_{\nu=1}^K Z_{\nu} v_{el}(\mathbf{x}_i - \mathbf{a}_{\nu}), \quad V_{ee} = \sum_{1 \leq i < j \leq N} v_{el}(\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j), \quad v_{el}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\mathbf{x}|},$$

wobei v_{el} als Newtonpotential bezeichnet wird.

Verwendet man zur Diskretisierung des Hamiltonoperators H dünne Gitter, wie in den Kapiteln 5 und 10 beschrieben, so bereitet das Potential V auf zweierlei Arten Probleme. Zum einen erschweren die auftretenden Singularitäten in den Potentialen die Berechnung der Einträge der Diskretisierungsmatrix und zum anderen können die Algorithmen zur schnellen Matrix-Vektor-Multiplikation, siehe Kapitel 7, nicht angewandt werden, da der Operator V_{ee} keine Tensorproduktstruktur besitzt. Die Idee ist nun, den Hamiltonoperator H durch einen gestörten Operator \tilde{H} zu ersetzen, der ebendiese Struktur aufweist und zudem keine Singularität mehr besitzt. Der Operator \tilde{H} wird dabei so bestimmt, dass der Fehler zwischen den Eigenwerten von H und \tilde{H} unterhalb der gewünschten Genauigkeit bleibt.

Zu diesem Zweck werden in diesem Abschnitt Abschätzungen hergeleitet, wie sich eine Approximation des Newtonpotentials auf die Eigenwerte auswirkt. Die Diskussion wird jedoch nicht allgemein für ein N -Teilchen-System durchgeführt, sondern nur anhand des Hamiltonoperators von Helium

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{x}} - \frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{y}} - \frac{2}{|\mathbf{x}|_2} - \frac{2}{|\mathbf{y}|_2} + \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}.$$

Die entsprechenden Potentialoperatoren sind demnach durch

$$V_{\text{ne}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{2}{|\mathbf{x}|_2} - \frac{2}{|\mathbf{y}|_2}, \quad V_{\text{ee}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}$$

gegeben. Die monoton steigenden Eigenwerte von H seien mit $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$ bezeichnet und die entsprechenden Eigenfunktionen mit u_1, u_2, \dots . Die erzielten Ergebnisse können jedoch auf Systeme mit mehr Elektronen verallgemeinert werden.

Wir beginnen mit der Annahme über die Struktur des Approximationsfehlers.

DEFINITION 12.1. Sei $\varepsilon > 0$. Durch \tilde{v}_{el} sei ein approximatives Newtonpotential gegeben, so dass für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$

$$(12.1) \quad v_{\text{el}}(\mathbf{x}) - \tilde{v}_{\text{el}}(\mathbf{x}) = \begin{cases} |\mathbf{x}|^{-1} & |\mathbf{x}| < \delta \\ \eta(\mathbf{x}) & |\mathbf{x}| \geq \delta \end{cases},$$

gelte, wobei der Fehler η durch $|\eta(\mathbf{x})| \leq \varepsilon$ beschränkt sei.

Das heißt \tilde{v}_{el} ist Null in einer δ -Umgebung von Null und unterscheidet sich außerhalb im Betrag um höchstens ε vom exakten Newtonpotential. Diese Struktur des Fehlers wird sich ergeben, wenn im nächsten Abschnitt das Newtonpotential durch eine Exponentialsumme angenähert wird. Außerhalb einer Kugel um den Ursprung kann die Approximante so konstruiert werden, dass das Potential bis auf einen Fehler ε approximiert wird. Innerhalb dieser Kugel jedoch können keine Fehlerschranken angegeben werden. Vereinfachend setzen wir in der Analyse daher die Approximante \tilde{v}_{el} dort Null.

Definiere nun aufbauend auf dem gestörten Newtonpotential \tilde{v}_{el} die Funktionen

$$\tilde{V}_{\text{ne}} = -2\tilde{v}_{\text{el}}(\mathbf{x}) - 2\tilde{v}_{\text{el}}(\mathbf{y}), \quad \tilde{V}_{\text{ee}} = \tilde{v}_{\text{el}}(\mathbf{x} - \mathbf{y}).$$

und die zugehörigen Multiplikationsoperatoren $\tilde{V}_{\text{ne/ee}}$. Setze als Fehler

$$W_{\text{ne}} = \tilde{V}_{\text{ne}} - V_{\text{ne}}, \quad W_{\text{ee}} = \tilde{V}_{\text{ee}} - V_{\text{ee}}.$$

sowie $W = W_{\text{ne}} + W_{\text{ee}}$, so dass der gestörte Hamiltonoperator durch $\tilde{H} = H + W$ gegeben ist.

Die grundlegende Frage ist nun, in wie weit sich die Eigenwerte des exakten Hamiltonoperators H und des gestörten Hamiltonoperators \tilde{H} unterscheiden. Aufbauend auf der Charakterisierung der Eigenwerte mit Hilfe des Satzes von Courant-Fischer, siehe z.B. (Parlett,

1980), wird in den folgenden beiden Lemmata der Term $\langle Wu, u \rangle$ abgeschätzt. Wir beginnen mit dem Beitrag W_{ne} , der die Störung des Elektron-Kern-Potentials beschreibt.

LEMMA 12.2. *Unter den Voraussetzung von Definition 12.1 gilt*

$$(12.2) \quad -4\varepsilon \|u\|_0^2 \leq \langle W_{ne}u, u \rangle \leq 4\varepsilon \|u\|_0^2 + 8\delta \|\nabla u\|_0^2,$$

falls u ein Element von $H^1(\mathbb{R}^6)$ ist.

BEWEIS. Betrachte zuerst nur die Störung des Potentials bezüglich des ersten Elektrons mit Koordinate \mathbf{x} . Man teilt für die Berechnung von

$$\langle W_{ne,\mathbf{x}}u, u \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} -2(\tilde{v}_{el}(\mathbf{x}) - v_{el}(\mathbf{x}))|u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y}$$

das Integrationsgebiet in zwei Teile ein: in den Bereich nahe des Kerns, d.h. $B_\delta(0) \times \mathbb{R}^3$, und dem Komplement. Nach Definition 12.1 verschwindet das Potential \tilde{v}_{el} innerhalb von $B_\delta(0)$, so dass

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B_\delta(0)} -2(\tilde{v}_{el}(\mathbf{x}) - v_{el}(\mathbf{x}))|u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} &= 2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B_\delta(0)} \frac{1}{|\mathbf{x}|} |u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \\ &\leq 2 \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B_\delta(0)} \delta \frac{1}{|\mathbf{x}|^2} |u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \leq 8\delta \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla_{\mathbf{x}} u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \end{aligned}$$

mit Hilfe der Hardy-Ungleichung von Satz 8.9 folgt. Eine Abschätzung nach unten folgt durch die Tatsache

$$v_{el}(\mathbf{x}) - \tilde{v}_{el}(\mathbf{x}) = \frac{1}{|\mathbf{x}|} \geq 0, \quad \text{für } |\mathbf{x}|_2 \leq \delta.$$

Insgesamt folgt damit

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^3} \int_{B_\delta(0)} -2(\tilde{v}_{el}(\mathbf{x}) - v_{el}(\mathbf{x}))|u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \leq 8\delta \|\nabla_{\mathbf{x}} u\|_0^2.$$

Ein analoger Ausdruck ergibt sich für die Abschätzung des Kernpotentials bezüglich y . Dabei muss $\nabla_{\mathbf{x}}$ durch $\nabla_{\mathbf{y}}$ ersetzt werden.

Für den Bereich weg vom Kern ergibt sich aus der Hölder-Ungleichung

$$\left| \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3 \setminus B_\delta(0)} -2(\tilde{v}_{el}(\mathbf{x}) - v_{el}(\mathbf{x}))|u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \right| \leq 2\varepsilon \|u\|_0^2,$$

da sich \tilde{v}_{el} und v_{el} nach Definition vom Betrage höchstens um ε unterscheiden. Setzt man die Ergebnisse zusammen, so folgt die Behauptung. \square

Eine ähnliche Abschätzung kann auch für das Elektron-Elektron-Potential gefunden werden.

LEMMA 12.3. *Unter den Voraussetzung von Definition 12.1 gilt folgende Abschätzung für die Störung W_{ee} :*

$$(12.3) \quad -\varepsilon \|u\|_0^2 - 2\delta \|\nabla u\|_0^2 \leq \langle W_{ee}u, u \rangle \leq \varepsilon \|u\|_0^2$$

für $u \in H^1(\mathbb{R}^6)$.

BEWEIS. Der Beweis verläuft ähnlich wie der des letzten Lemmas. Zuerst wird der Bereich der Integration in

$$D_\delta = \{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 \leq \delta\} \subset \mathbb{R}^6$$

und in das Komplement $\mathbb{R}^6 \setminus D_\delta$ aufgeteilt. Für die Integration über D_δ ergibt sich

$$\begin{aligned} 0 &\geq \int_{D_\delta} (\tilde{v}_{\text{el}}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) - v_{\text{el}}(\mathbf{x} - \mathbf{y})) |u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \\ &\geq -\delta \int_{D_\delta} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} |u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y} \geq -2\delta \int_{\mathbb{R}^6} |\nabla u(\mathbf{x}, \mathbf{y})|^2 \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y}, \end{aligned}$$

wobei hier der Satz von Fubini und die Hardy-Ungleichung benutzt wurden. Der Teil außerhalb von D_δ kann wiederum durch $\pm\varepsilon\|u\|_0^2$ abgeschätzt werden. Damit folgt die Behauptung. \square

Fasst man beide Störungen zusammen, so erhält man direkt folgende Abschätzungen für die Störung des Potentials und die dadurch resultierende Verschiebung des Spektrums.

SATZ 12.4. *Unter den Voraussetzung von Definition 12.1 gilt für die Störung*

$$(12.4) \quad -5\varepsilon\|u\|_0^2 - 2\delta\|\nabla u\|_0^2 \leq \langle Wu, u \rangle \leq 5\varepsilon\|u\|_0^2 + 8\delta\|\nabla u\|_0^2.$$

Weiterhin gilt für Eigenwerte $\tilde{\lambda}_k$ des gestörten Operators \tilde{H}

$$|\lambda_k - \tilde{\lambda}_k| \leq 32 \max(\delta, \varepsilon)(\lambda_k + \mu)$$

wobei μ die Verschiebung in Gleichung (8.13) ist.

BEWEIS. Die Abschätzung der Störung folgt direkt aus den beiden vorangegangenen Lemmata. Als leichte Verschlechterung folgt direkt

$$|\langle Wu, u \rangle| \leq 8 \max(\delta, \varepsilon) \|u\|_{H^1(\mathbb{R}^6)}.$$

Aus der Normäquivalenz des verschobenen Hamiltonoperators und der H^1 -Norm, siehe Satz 8.10, folgt

$$\frac{1}{4} \|u\|_1^2 \leq \langle (H + \mu)u, u \rangle \leq M \|u\|_1^2.$$

Eingesetzt in der letzten Gleichung ergibt sich

$$|\langle Wu, u \rangle| \leq c \langle (H + \mu)u, u \rangle, \quad c = 32 \max(\delta, \varepsilon).$$

Demnach folgt sofort für den Rayleigh-Quotienten des gestörten Operators $\tilde{H} = H + W$

$$\langle \tilde{H}u, u \rangle \begin{cases} \leq (1 + c) \langle Hu, u \rangle + c\mu \|u\|_0^2 \\ \geq (1 - c) \langle Hu, u \rangle - c\mu \|u\|_0^2. \end{cases}$$

Durch das Charakterisierung der Eigenwerte mit Hilfe des Satzes von Courant-Fischer folgt damit für alle Eigenwerte unterhalb des essentiellen Spektrums

$$|\tilde{\lambda}_k - \lambda_k| \leq c(\lambda_k + \mu),$$

also die Behauptung. \square

Wendet man diese Abschätzung auf den kleinsten Eigenwert λ_1 des Heliumatoms an, so folgt

$$(12.5) \quad |\tilde{\lambda}_k - \lambda_k| \leq 2240 \max(\varepsilon, \delta)$$

wobei $\mu = 72\frac{1}{4}$ und $\lambda_1 \leq -2\frac{1}{4}$ gesetzt wurden.

Die Abschätzung nach oben kann noch verbessert werden, wenn das Virialtheorem, siehe z.B. (Yserentant, 2010a), verwendet wird. Diese Aussage gilt jedoch nur speziell im Falle von Atomen und nicht mehr allgemein für Moleküle.

SATZ 12.5. *Unter den Voraussetzung von Definition 12.1 gilt für den kleinsten Eigenwert des gestörten Operators*

$$(12.6) \quad \tilde{\lambda}_1 \leq \lambda_1 + 5\varepsilon + 16\delta|\lambda_1|,$$

wobei λ_1 der kleinste Eigenwert des ungestörten Hamiltonoperators ist.

BEWEIS. Sei u_1 der in der $L^2(\mathbb{R}^6)$ normierte Grundzustand des ungestörten Hamiltonoperators H . Dann gilt durch die variationelle Charakterisierung

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= \min_{\|u\|_0=1} \langle \tilde{H}u, u \rangle \leq \langle \tilde{H}u_1, u_1 \rangle = \langle Hu_1, u_1 \rangle + \langle Wu_1, u_1 \rangle \\ &\leq \lambda_1 + 5\varepsilon + 8\delta\|\nabla u_1\|_0^2. \end{aligned}$$

Der Norm im letzten Summanden kann physikalisch als die doppelte kinetische Energie interpretiert werden. Durch das Virialtheorem kann sie durch die Energie der Eigenfunktion u_1 ausgedrückt werden, siehe z.B. (Yserentant, 2010a). Es gilt

$$\frac{1}{2}\|\nabla u_1\|_0^2 = (-\lambda_1)\|u_1\|_0^2$$

und somit die Behauptung. \square

Um die eine explizite Schranke für den Fehler in λ_1 zu erhalten, muss der Betrag des kleinsten Eigenwerts λ_1 nach oben abgeschätzt werden. Dazu vernachlässigt man die Elektron-Elektron-Wechselwirkung in H und kann so aus den bekannten Energieeigenwerten des Wasserstoffatoms die Schranke $|\lambda_1| \leq 4$ herleiten. Damit folgt

$$(12.7) \quad \tilde{\lambda}_1 \leq \lambda_1 + 5\varepsilon + 64\delta.$$

als obere Abschätzung für den kleinsten Eigenwert des gestörten Operators \tilde{H} . Diese Abschätzung ist im Vergleich zu Gleichung (12.5) um einen Faktor von etwa 50 besser.

2. Exponentialsummen

In diesem Abschnitt wird das Newtonpotential v_{el} durch eine kurze Summe von Elementartensoren approximiert:

$$(12.8) \quad v_{\text{el}} \approx \tilde{v}_{\text{el}} := \sum_{k=1}^K \bigotimes_{i=1}^3 v_{k,i}.$$

Die Approximation soll dabei so gewählt werden, dass die entsprechende Störung des Spektrums kleiner als die chemischen Genauigkeit von 1kcal/mol ist. Dies entspricht in etwa 1.6mHa und damit in den hier verwendeten dimensionslosen Einheiten $1.6 \cdot 10^{-3}$.

Approximationen der Form (12.8) wurden in (Beylkin und Mohlenkamp, 2004; Hackbusch, 2006) hergeleitet und zum Beispiel in (Beylkin et al., 2008) verwendet. Als Grundlage dafür dient die in der Quantenchemie wohl bekannte Gleichung

$$(12.9) \quad \frac{1}{\sqrt{t}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-t \cdot u^2} du,$$

wobei hier speziell $t = |\mathbf{x}|_2^2$ gesetzt wird. Anstatt des Integral exakt auszurechnen kann nun stattdessen eine näherungsweise Berechnung des Integrals durch numerische Quadratur erfolgen. Als Ergebnis erhält man nach (Hackbusch, 2006) eine Entwicklung der Form

$$(12.10) \quad E_K(t) = \sum_{\ell=1}^K \omega_\ell e^{\alpha_\ell t},$$

wobei die Quadraturpunkt und die Gewichte optimiert werden. Der Fehler ist dabei durch

$$(12.11) \quad \sup_{t \in [1, R_K]} |t^{-1/2} - E_K(t)| \leq \varepsilon_K$$

beschränkt, wobei die Parameter R_K und ε_K von der Anzahl der Summanden K abhängen.

Nach Definition 12.1 benötigen wir eine Approximation von $(|\mathbf{x}|_2^2)^{-1/2}$ auf einem Bereich mit $\|\mathbf{x}\|_2 \geq \delta$. Durch Umskalierung folgt, dass

$$\sup_{\delta \leq |\mathbf{x}|_2 \leq R} \left| \frac{1}{|\mathbf{x}|_2} - \frac{1}{\delta} E_K(|\mathbf{x}|_2^2/\delta^2) \right| \leq \varepsilon$$

mit $\varepsilon = \varepsilon_K/\delta$ und $R = \delta \sqrt{R_K}$ gilt, wie man direkt nachrechnen kann. Wählt man nun R so, dass $R \geq 1/\varepsilon$ gilt, so folgt, dass die Nullfunktion auf $|\mathbf{x}|_2 \geq R$ in diesem Bereich das Newtonpotential ebenfalls bis auf eine Genauigkeit von ε approximiert.

Setzt man nun

$$\varepsilon = 10^{-4}, \quad \delta = 10^{-5}, \quad R \geq 10^4,$$

so erhält nach Gleichung (12.7) die Abschätzung

$$\tilde{\lambda}_1 \leq \lambda_1 + 1.24 \cdot 10^{-3}$$

für den kleinsten Eigenwert des gestörten Operators \tilde{H} . Damit liegt die Genauigkeit unter der geforderten chemischen Genauigkeit. Die Coulombwechselwirkung wird bei dieser Wahl der Parameter bis zum Abstand von 10^{-5} atomaren Einheiten von der Singularität, das entspricht in etwa dem Kernradius, auf 10^{-4} genau approximiert.

Um diese Genauigkeit zu erreichen, genügt es, in den ursprünglichen Größen die Entwicklung in Exponentialsummen mit

$$K = 50, \quad \varepsilon_{50} = 10^{-9}, \quad R_{50} = 10^{18}$$

zu wählen (Hackbusch, 2006, Tabellen im Internet). Damit wird das elektrostatische Potential in 50 Summanden zerlegt. In Abbildung 1 wird der Fehler der Exponentialsumme dargestellt. Für die Bereiche nahe der Singularität, das heißt für Abstände kleiner als 10^{-5} , und für große Abstände ist der Fehler fast identisch zum eigentlichen Potential das ebenfalls eingezeichnet ist.

Zum Test wurde eine Hartree-Fock Lösung des kleinsten Eigenwertes von Helium, berechnet von MOLPRO, eingesetzt. Die Rayleighquotienten dieser Lösung bezüglich des exakten Operators H und des gestörten Operators \tilde{H} ergeben

$$\lambda_{\text{HF}} = -2.86162484, \quad \tilde{\lambda}_{\text{HF}} = -2.86162492.$$

Die Energie zum gestörten Hamiltonoperator liegt somit ungefähr 10^{-7} Hartree höher, die Abschätzung ist in diesem Fall also sehr viel pessimistischer.

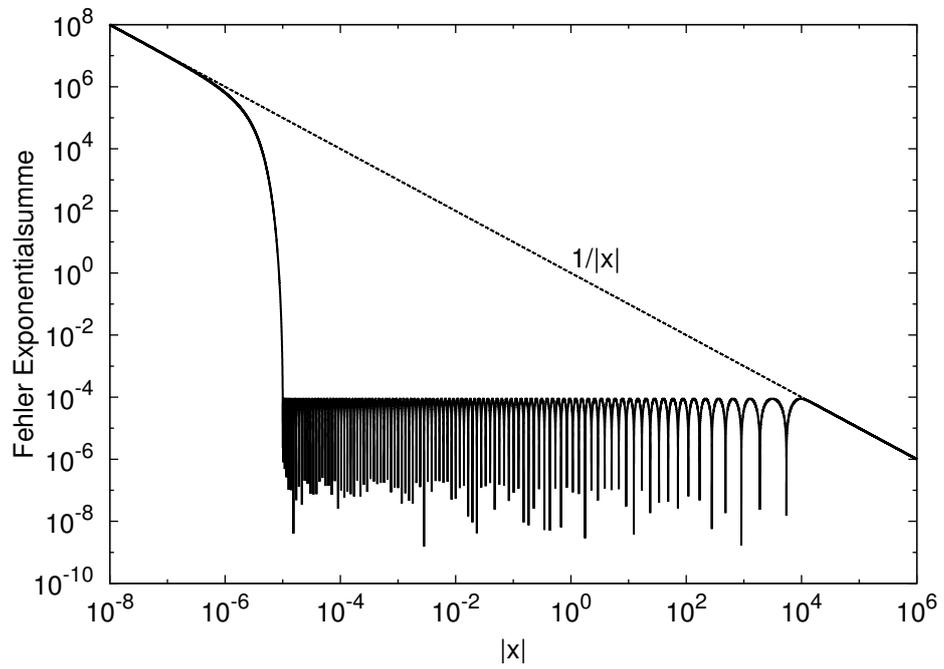


ABBILDUNG 1. Fehler der Exponentialsumme mit $K = 50$ Termen zum exakten Coulombpotential $1/|x|$ (gestrichelt).

Numerische Behandlung des Heliumatoms

In diesem Kapitel wird die Diskretisierung des Heliumatoms mit Hilfe dünner Gittern beschrieben und numerische Ergebnisse präsentiert. Anstatt das exakte Eigenwertproblem bezüglich des Hamiltonoperators

$$H = -\frac{1}{2}\Delta_x - \frac{1}{2}\Delta_y - \frac{2}{|\mathbf{x}|_2} - \frac{2}{|\mathbf{y}|_2} + \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}$$

zu lösen, wird das Eigenwertproblem bezüglich des gestörten Hamiltonoperator \tilde{H} des letzten Kapitels näherungsweise gelöst. Die dort durchgeführte Approximation des Newtonpotentials erlaubt die effizienten Algorithmen zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts, siehe Kapitel 7, zu verwenden. Weiterhin sind zur Bestimmung der Einträge der Diskretisierungsmatrix keine Integrale mit singulären Integranden zu berechnen.

Da keine spezielle Symmetrie des Atoms ausgenutzt wird, kann das System auch als Testbeispiel für allgemeine N -Teilchen-Probleme gesehen werden. Aus diesem Grund wird zur Diskretisierung ein dünnes Gitter verwendet, obwohl keine zusätzliche gemischte Regularität der Eigenfunktionen zu erwarten ist.

Spezieller Wert wird dabei darauf gelegt, die Diskretisierungsmatrix auch für den Operator h_2 nie explizit aufzustellen. Auf Grund der Approximation des Newtonpotentials durch eine Summe von Tensorprodukten wirken die Operatoren nur auf maximal zwei Variablen. Verwendet man zur Berechnung des Matrix-Vektor-Produkts den Algorithmus von Schwab und Todor so müssen nur die Faktoren der einzelnen Blöcke gespeichert werden. Damit ergeben sich große Einsparmöglichkeiten in der Speicherung der Diskretisierungsmatrizen.

Jedoch ist mit dieser Vorgehensweise auch ein Nachteil verbunden. Um die Tensorproduktstruktur auszunutzen zu können, müssen die entsprechenden Ansatzräume ebenfalls die Tensorproduktstruktur widerspiegeln. Dies führt dazu, dass Adaptivität im Ansatzraum nur bedingt realisiert werden kann.

Der Rest des Kapitels ist wie folgt aufgebaut. Im ersten Abschnitt werden die Ansatzräume diskutiert. Abschnitt 2 beschäftigt sich mit der Struktur der Diskretisierungsmatrizen und der effizienten Realisierung von Matrix-Vektor-Multiplikationen. In Abschnitt 3 wird kurz auf die effiziente Berechnung der Matrixelemente eingegangen. Im letzten Abschnitt werden numerische Ergebnisse vorgestellt.

1. Diskretisierung des Heliumatoms

Zur Diskretisierung des Eigenwertproblems des gestörten Hamiltonoperators \tilde{H} des letzten Kapitels werden entsprechend Kapitel 11 anisotrope Tensorproduktwavelets verwendet. Dabei wird die Mehrskalenganalyse aus eindimensionalen Prewavelets aufgebaut, siehe auch (Niedermeier, 1999; Feuersänger, 2005).

Diese Ansatzfunktionen sind stückweise linear und besitzen einen beschränkten Träger. Die Skalierungsfunktion ist dabei die wohlbekanntes Hutfunktion, das Wavelet ist in Abbildung 1 dargestellt. Die Wavelets sind dabei zwischen verschiedenen Stufen orthogonal, jedoch nicht innerhalb der gleichen.

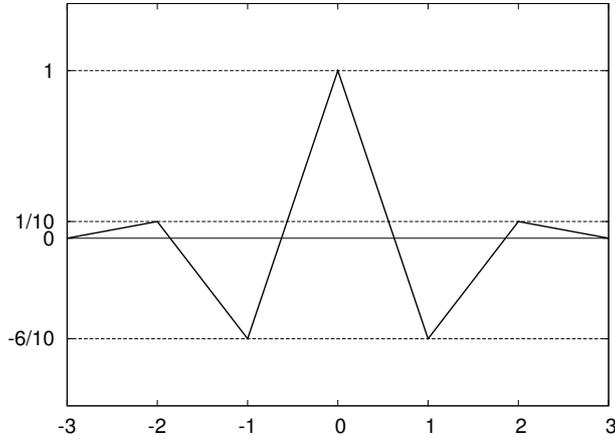


ABBILDUNG 1. Skizze des eindimensionalen Prewavelets.

Die eindimensionalen Wavelets erfüllen dabei eine Normäquivalenz für Sobolevräume $H^s(\mathbb{R})$ für $s < 3/2 = \tau$, siehe auch Gleichung (4.7). Im Hinblick auf die Voraussetzungen aus Korollar 10.9 erfüllen diese Funktionen nicht die Anforderungen bezüglich der Regularität, da $\tau \not\geq 3/2$ gilt. Legt man die vermuteten verbesserten Regularitätsaussagen (Kreusler, 2010) mit $s = 3/4$ zugrunde, so sollte sogar $\tau > 7/4$ gelten, um die bestmögliche Konvergenzrate zu erhalten.

Um die Voraussetzungen an die Wavelets abzumildern, kann jedoch die Strategie von Kapitel 5, Abschnitt 5 angewandt werden: anstatt ein zweidimensionales Tensorprodukt von Wavelets in drei Variablen zu verwenden, wird ein sechsdimensionales anisotropes Tensorprodukt von Funktionen in jeweils einer Variable verwendet. Aus Korollar 5.15 folgt, dass zum Erreichen der bestmöglichen Approximationsrate (bis auf logarithmische Faktoren) nur noch eine Normäquivalenz von $\tau > 1 + s/3$ benötigt wird. Setzt man hier wiederum $s = 3/4$, so benötigt man nur noch $\tau > 5/4$. Die verwendeten Prewavelets erfüllen damit diese Voraussetzung.

Weiterhin wird das Gebiet für die Diskretisierung im Voraus auf den Würfel $-[4, 4]^6$ beschränkt, vergleiche dazu die Approximationsaussagen von Kapitel 5, Abschnitt 4. Ein solches Vorgehen vereinfacht die numerische Realisierung. Um aber eine gewisse Adaptivität zu ermöglichen, wird das dünne Gitter aus Teilräumen der Form

$$\tilde{V}_\ell = \{\psi_\lambda \mid \lambda \in \mathcal{I}_\ell\} \subset \{\psi_\lambda \mid \lambda \in \nabla, |\lambda| = \ell\}$$

mit einer geeignet gewählten Indexmengen $\{\mathcal{I}_\ell\}_\ell$ aufgebaut. Insbesondere kann damit die Struktur der Dünngitterräume aus Kapitel 5, Abschnitt 3 nachgebildet werden, wo Wavelets höherer Stufe näher am Ursprung lokalisiert sein müssen.

Die Menge aller Ansatzfunktionen ist jedoch nicht notwendigerweise ein dünnes Gitter, sondern ist durch eine Summe von Tensorprodukten, das heißt durch

$$(13.1) \quad G_{\mathcal{J}} := \bigcup_{\vec{\ell} \in \mathcal{J}} Z_{\vec{\ell}}, \quad Z_{\vec{\ell}} := \bigotimes_{i=1}^6 \tilde{V}_{\ell_i}, \quad \mathcal{J} \subset \mathbb{N}^6$$

gegeben. Dabei wird $Z_{\vec{\ell}}$ durch alle Basiselemente $\psi_{\vec{\lambda}}$ mit $\vec{\lambda}$ Element von $\mathcal{I}_{\vec{\ell}} := \times_{i=1}^6 \mathcal{I}_{\ell_i}$ aufgespannt.

2. Diskretisierungsmatrizen

In diesem Abschnitt wird untersucht, wie mit Hilfe der Näherung des Newtonpotentials als Summe von Tensorprodukten die in Kapitel 7 vorgestellte schnelle Matrix-Vektor-Multiplikation verwendet werden kann. Speziell wird der Algorithmus von Schwab und Todor, siehe Kapitel 7, Abschnitt 3, dahingehend analysiert.

Der gestörte Hamiltonoperator \tilde{H} lässt sich als

$$\tilde{H} = T + \tilde{V}_{ne} + \tilde{V}_{ee}$$

darstellen. Dabei kann der Operator der kinetischen Energie als

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^6 \text{Id} \otimes \dots \otimes \Delta \otimes \dots \otimes \text{Id}$$

geschrieben werden, wobei der Operator Δ an der i -ten Stelle der Laplaceoperator bezüglich einer Variable ist. Das gestörte Kernpotential setzt sich aus

$$\begin{aligned} \tilde{V}_{ne} = & -2 \cdot \sum_{i=1}^{50} \alpha_i \cdot E_i \otimes E_i \otimes E_i \otimes \text{Id} \otimes \text{Id} \otimes \text{Id} \\ & - 2 \cdot \sum_{i=1}^{50} \alpha_i \cdot \text{Id} \otimes \text{Id} \otimes \text{Id} \otimes E_i \otimes E_i \otimes E_i \end{aligned}$$

zusammen, wobei E_i die zu $\exp(-\omega_i |\cdot|^2)$ gehörenden Multiplikationsoperatoren sind, vergleiche (12.10). Im Gegensatz zu den vorgestellten Operatoren zerfällt die Elektron-Elektron-Wechselwirkung nicht vollständig in eine Summe von Tensorproduktoperatoren in einer Dimension. Vielmehr gilt

$$\tilde{V}_{ee} = \sum_{i=1}^{50} \alpha_i \cdot E_i(x_1, y_1) \otimes E_i(x_2, y_2) \otimes E_i(x_3, y_3).$$

Mit den Variablen soll angedeutet auf welche Variablen die einzelnen Operatoren wirken. Bei entsprechender Umordnung $[\mathbf{x}, \mathbf{y}] \rightarrow [x_1, y_1, x_2, y_2, x_3, y_3]$ gilt wiederum

$$\tilde{V}_{ee} = \sum_{i=1}^{50} \alpha_i \cdot E_i \otimes E_i \otimes E_i,$$

wobei die Multiplikationsoperatoren diesmal auf zwei Variablen wirken.

Berechnet man nun die Galerkinmatrix des gestörten Operators \tilde{H} bezüglich der Ansatzfunktionen (13.1), so erhält man analog zu Abschnitt 1 eine Matrix

$$\tilde{H} = [\tilde{H}_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'}]_{\vec{\ell}, \vec{\ell}' \in \mathcal{J}}$$

mit Blöcken

$$\tilde{H}_{\vec{\ell}, \vec{\ell}'} = I_{\vec{\ell}}' \tilde{H} I_{\vec{\ell}}.$$

Die einzelnen Blöcke können gemäß der oben besprochenen Zerlegung von \tilde{H} wiederum als Summe von Tensorprodukten geschrieben werden, da ebenfalls die Unterräume $Z_{\vec{\ell}}$ nach Gleichung (13.1) Tensorproduktstruktur besitzen.

Insgesamt müssen demnach für die Operatoren Id , Δ und E_i die Diskretisierungsmatrizen

$$(13.2) \quad I_{\ell}' \text{Id} I_{\ell'}, \quad I_{\ell}' \Delta I_{\ell'}, \quad I_{\ell}' \text{Id} I_{\ell'}$$

für alle ℓ, ℓ' berechnet werden, die mindestens einmal in der Menge \mathcal{J} vorkommen. Weiterhin müssen ebenfalls die Matrizen

$$(13.3) \quad I_{\ell_1, \ell_2}' E_i I_{\ell_1', \ell_2'}$$

für alle $\ell_1, \ell_2, \ell'_1, \ell'_2$ berechnet werden, so dass die Paare (ℓ_1, ℓ_2) und (ℓ'_1, ℓ'_2) mindestens einmal in der Indexmenge \mathcal{J} vorkommen. Mit Hilfe dieser Diskretisierungsmatrizen kann der Algorithmus SCHWABTODOR aus Abschnitt 3 direkt angewendet werden.

Um die Einsparung bezüglich des Speicherbedarfs abzuschätzen, nehmen wir an, dass $G_{\mathcal{J}}$ ein sechsdimensionales dünnes Gitter der Stufe L ist. Stellt man die Matrizen explizit auf, so kann man analog zum Abschnitt 6 zeigen, dass asymptotisch in L dafür $L^4 2^{2L}$ Einträge nötig sind. Im Gegensatz dazu müssen bei Anwendung des Algorithmus SCHWABTODOR die Diskretisierungsmatrizen bezüglich Id , Δ , $(E_i)_{i=1, \dots, 50}$ gespeichert werden. Für die Diskretisierungsmatrizen bezüglich einer Variablen werden für alle $\ell, \ell' \leq L$ benötigt, womit sich insgesamt $L^2 L$ Einträge ergeben. Der logarithmische Faktor kann durch Ausnutzen der Mehrskalenstruktur noch eingespart werden. Entscheidend für die Komplexität sind hingegen die Matrizen $I'_{\ell_1, \ell_2} E_i I_{\ell'_1, \ell'_2}$. Diese müssen auf Grund der Struktur des Ansatzraums nur für solche Indizes berechnet werden, für die $\ell_1 + \ell_2, \ell'_1 + \ell'_2 \leq L$ gilt, sprich auf einem zweidimensionalen dünnen Gitter. Nach Abschnitt 6 sind dazu $L 2^{2L}$ Elemente asymptotisch in L notwendig.

Durch diese Überlegungen sieht man, dass der Speicherbedarf um den logarithmische Faktor L^3 kleiner ist. Für die Realisierung kann jedoch ein Faktor von 1000 im Speicherbedarf ($L = 10$) entscheidend sein.

3. Berechnung der Matrixelemente

In diesem Abschnitt wird die Berechnung der Matrixelemente der in den Gleichungen (13.2) und (13.3) gegebenen Diskretisierungsmatrizen beschrieben. Dabei müssen eindimensionalen Integrale

$$\int \psi_{\lambda}(x) \cdot \psi_{\lambda'}(x) dx, \quad \int \psi'_{\lambda}(x) \cdot \psi'_{\lambda'}(x) dx, \quad \int \psi_{\lambda}(x) e^{-\alpha x^2} \psi_{\lambda'}(x) dx$$

mit $\lambda, \lambda' \in \nabla$ sowie zweidimensionale Integrale

$$(13.4) \quad \int \psi_{\lambda_1}(x) \psi_{\lambda_2}(y) e^{-\alpha(x-y)^2} \psi_{\lambda'_1}(x) \psi_{\lambda'_2}(y) dx dy$$

für Indizes $\lambda_1, \lambda_2, \lambda'_1, \lambda'_2 \in \nabla$ berechnet werden. Der Parameter α variiert dabei über einen großen Bereich von etwa $4 \cdot 10^{-8}$ bis $8 \cdot 10^8$.

Der vorgestellte Weg eignet sich für alle Funktionen, die stückweise aus Polynomen aufgebaut sind und einen beschränkten Träger besitzen. Insbesondere gilt dies für B -Splines und die verwendeten Prewavelets. Für diesen Fall besitzt auch das Produkt $\psi_{\lambda}(x) \psi_{\lambda'}(x)$ beschränkten Träger und lässt sich als stückweises Polynom schreiben.

Sind die Basisfunktionen stückweise Polynome m -ten Grades, so gilt zum Beispiel für die Elemente der Massematrix

$$\int \psi_{\lambda}(x) \cdot \psi_{\lambda'}(x) dx = \sum_i \int_{I_i} p_i(x) dx,$$

wobei $(I_i)_i$ endlich viele disjunkte Intervalle und die $(p_i)_i$ Polynome vom Grade $2m$ sind. Diese Integrale lassen sich numerisch leicht berechnen. Für Prewavelets gilt hier $m = 1$.

Die Integrale

$$(13.5) \quad \int \psi_{\lambda}(x) e^{-\alpha x^2} \psi_{\lambda'}(x) dx = \sum_i \int_{I_i} p_i(x) e^{-\alpha x^2} dx,$$

besitzen für verschiedene α unterschiedlichen Charakter. Für $\alpha \rightarrow 0$ konvergiert das Integral gegen den entsprechenden Eintrag der Massematrix und für $\alpha \rightarrow \infty$ bis auf Normalisierung gegen die Punktauswertung an der Stelle $x = 0$. Numerisch kann man solche

Integrale effizient berechnen, indem man das Integral in Abhängigkeit von α in charakteristische Teilintervalle aufteilt und auf jedem einzelnen Gebiet eine adaptive Integration mit Quadraturformeln hohen Grades ausführt.

Eine analog Strategie führt auch bei den zweidimensionalen Integralen zum Ziel. Durch geschickte Transformation der Variablen kann das zweidimensionale Integral von Gleichung (13.4) auf ein eindimensionales zurückgeführt werden. Dazu transformieren wir zuerst ein achsenparalleles Rechteck auf Relativ- und Schwerpunktkoordinaten.

LEMMA 13.1. *Gegeben seien Intervalle $I_x = [x_0, x_1]$ und $I_y = [y_0, y_1]$ mit $x_0 \leq x_1$ und $y_0 \leq y_1$. Weiterhin gelte $x_1 - x_0 \geq y_1 - y_0$. Führe durch die Transformation*

$$r = x - y, \quad s = \frac{1}{2}(x + y)$$

Relativ- und Schwerpunktkoordinaten ein. Dann gilt

$$I_x \times I_y = B_1 \cup B_2 \cup B_3$$

mit den Bereichen

$$B_1 = \{(r, s) \mid r_0 \leq r \leq r_1, x_0 - r/2 \leq s \leq y_1 + r/2\}$$

$$B_2 = \{(r, s) \mid r_1 \leq r \leq r_2, y_0 + r/2 \leq s \leq y_1 + r/2\}$$

$$B_3 = \{(r, s) \mid r_2 \leq r \leq r_3, y_0 + r/2 \leq s \leq x_1 - r/2\}.$$

Die Konstanten sind dabei durch $r_0 = x_0 - y_0$, $r_1 = x_0 - y_0$, $r_2 = x_1 - y_1$, $r_3 = x_1 - y_0$ gegeben. Einzelne oder auch alle Gebiete können dabei leer sein.

BEWEIS. Die Relativkoordinaten der Eckpunkte $(x_i, y_j)_{i,j=0,1}$ ergeben sich zu

$$\begin{aligned} r_0 &= r(x_0, y_1) = x_0 - y_1, & r_1 &= r(x_0, y_0) = x_0 - y_0, \\ r_2 &= r(x_1, y_1) = x_1 - y_1, & r_3 &= r(x_1, y_0) = x_1 - y_0. \end{aligned}$$

Diese sind nach Voraussetzung an die Intervalle monoton steigend, d.h. es gilt $r_0 \leq r_1 \leq r_2 \leq r_3$. Die Schwerpunktkoordinate s muss wegen $x = s + r/2$ und $y = s - r/2$ die Ungleichungen $x_0 \leq s + r/2 \leq x_1$ und $y_0 \leq s - r/2 \leq y_1$ erfüllen. In den jeweiligen Bereichen $r_i \leq r \leq r_{i+1}$ der Relativkoordinate kann man die Grenzen explizit bestimmen und erhält damit die Behauptung. \square

In diesen neuen Koordinaten kann ein Integral wie folgt geschrieben werden.

LEMMA 13.2. *Seien φ, ψ stetige Funktionen und die Intervalle I_x und I_y wie in Lemma 13.1 gegeben. Dann gilt*

$$\iint_{I_x \times I_y} \varphi(x) e^{-\alpha(x-y)^2} \psi(y) \, dx dy = \sum_{i=1,2,3} \int_{r_{i-1}}^{r_i} e^{-\alpha r^2} H_i(r) \, dr$$

mit den Funktionen

$$H_1(r) = \int_{x_0 - r/2}^{y_1 + r/2} h(r, s) \, ds, \quad H_2(r) = \int_{y_0 + r/2}^{y_1 + r/2} h(r, s) \, ds,$$

$$H_3(r) = \int_{y_0 + r/2}^{x_1 - r/2} h(r, s) \, ds$$

mit $h(s, r) = \varphi(s + r/2)\psi(s - r/2)$.

BEWEIS. Durch die Transformationsatz gilt in den Relativ- und Schwerpunktkoordinaten

$$\iint_{I_x \times I_y} \varphi(x) e^{-\alpha(x-y)^2} \psi(y) \, dx dy = \int_{B_1 \cup B_2 \cup B_3} \varphi(s + r/2) e^{-\alpha r^2} \psi(s - r/2) \, dr ds$$

nach Lemma 13.1. Nun teilt man das Integral in die Bereiche B_1 , B_2 und B_3 auf und verwendet den Satz von Fubini. \square

Durch die Zerlegung der Integration über r in die einzelnen Bereiche $[r_{i-1}, r_i]$ für $i = 1, 2, 3$ sind die Funktionen $H_i(r)$ Polynome, wenn es die Faktoren φ und ψ sind.

KOROLLAR 13.3. *Seien die gleichen Voraussetzungen wie in Lemma 13.2 gegeben. Weiterhin seien φ, ψ Polynome n -ten Grades. Dann ist h in r und s ein Polynom $(2n)$ -ten Grades, das heißt es gilt*

$$h(r, s) \in \text{span}\{r^i \cdot s^j \mid i + j \leq 2n, i, j \geq 0\}$$

Weiterhin ist $H_i(r)$ ein Polynom in r vom Grade höchstens $2n + 1$.

BEWEIS. Durch Ausmultiplizieren sieht man, dass die Faktoren $\varphi(s+r/2)$ und $\psi(s-r/2)$ Polynome in r und s vom Grade n sind. Somit ist $h(r, s)$ ein Polynom vom Grade $2n$. Integriert man nun über s erhöht sich der Polynomgrad um eins auf $2n + 1$. Setzt man nun die Grenzen ein, die affin-lineare Ausdrücke in r sind, so ergibt sich ein Polynom in r vom Grade $2n + 1$. \square

Durch die Ergebnisse kann man nun eine effiziente numerische Quadratur zur Berechnung des Integrals von Gleichung (13.4) angeben. Setze dazu

$$\varphi(x) = \psi_{\lambda_1}(x) \cdot \psi_{\lambda_1'}(x), \quad \psi(y) = \psi_{\lambda_2}(y) \cdot \psi_{\lambda_2'}(y)$$

und zerlege das Integral in achsenparallele Teilgebiete, auf denen sowohl φ als auch ψ Polynome sind. Ohne Einschränkung kann dabei angenommen werden, dass der Träger von φ größer als der von ψ ist, ansonsten tauscht man. Sind die Funktionen ψ_λ stückweise Polynome m -ten Grades, so sind die Funktionen φ und ψ Polynome vom Grade $2m$. Für die Integration von

$$\int_{r_{i-1}}^{r_i} e^{-\alpha r^2} H_i(r) \, dr$$

kann man die gleiche numerische Quadratur benutzen wie für (13.5). Für die Auswertung der Funktion $H_i(r)$ an bestimmten Punkten kann man die Integration über s exakt ausführen, wenn eine Quadraturformel gewählt wird, die exakt für Polynome vom Grad $2m$ ist. Im vorliegenden Fall gilt $m = 1$, so dass eine Quadraturformel gewählt werden sollte, die exakt bis zum Grade zwei ist.

4. Numerische Ergebnisse

In diesem Abschnitt werden die numerischen Ergebnisse zur Berechnung des kleinsten Eigenwertes von Helium vorgestellt. Als Ansatzfunktionen wurde wie in Abschnitt 1 beschrieben vollständig anisotrope Prewavelets verwendet. Als Löser wurde der iterative Eigenwertlöser LOBPCG verwendet (Knyazev, 2001). Die Anwendung der Galerkinmatrix wurde dabei wie in Abschnitt 2 durch blockweise Matrix-Vektor-Multiplikation realisiert. Als Vorkonditionierer wurde die Diagonalmatrix aus Kapitel 6, Abschnitt 2 verwendet.

Die Ansatzräume wurden wie in Gleichung (13.1) gewählt, wobei die Indexmenge \mathcal{J} und die Räume \tilde{V}_ℓ adaptiv verfeinert wurden. Der entsprechende Algorithmus zur heuristischen Auswahl wurde dabei folgendermaßen realisiert, siehe auch (Bungartz und Griebel, 2004).

Für eine gegebene Näherungslösung mit Koeffizienten $u_{\vec{\lambda}}$ bezüglich des Ansatzraums $G_{\mathcal{J}}$ werden alle Indizes $\vec{\lambda} \in \nabla^6$ bestimmt, so dass $\psi_{\vec{\lambda}} \in G_{\mathcal{J}}$ gilt und noch nicht alle direkten

Schritt	$\#G_{\mathcal{J}}$	λ_{\min} [Ha]	Fehler [Ha]
1	13	-1.87240	$1.03132 \cdot 10^{+0}$
2	85	-2.10651	$7.97218 \cdot 10^{-1}$
3	225	-2.23722	$6.66505 \cdot 10^{-1}$
4	701	-2.38431	$5.19418 \cdot 10^{-1}$
5	1997	-2.50358	$4.00144 \cdot 10^{-1}$
6	5041	-2.60453	$2.99192 \cdot 10^{-1}$
7	14945	-2.69790	$2.05820 \cdot 10^{-1}$
8	49697	-2.77765	$1.26069 \cdot 10^{-1}$
9	169537	-2.82921	$7.45184 \cdot 10^{-2}$
10	611825	-2.86152	$4.22049 \cdot 10^{-2}$
11	2189153	-2.88016	$2.35664 \cdot 10^{-2}$
12	7446169	-2.89056	$1.31629 \cdot 10^{-2}$
13	24367489	-2.89604	$7.68481 \cdot 10^{-3}$
Extrapoliert		-2.90202	$1.70726 \cdot 10^{-3}$

TABELLE 1. Berechnete Näherungen an den kleinsten Eigenwert λ_{\min} von Helium. Die Gitter $G_{\mathcal{J}}$ wurden adaptiv erzeugt durch die Bedingung (13.6) erzeugt, wobei der Parameter $\theta = 0.4$ gesetzt wurde. Als Referenzwert wurde der in (Sims und Hagstrom, 2002) berechnete Wert verwendet. Der extrapolierte Wert wurde auf Basis der letzten drei Approximationen berechnet.

Nachkommen von $\psi_{\vec{\lambda}}$ in $G_{\mathcal{J}}$ enthalten sind. Diese Menge sei im Folgenden mit \mathcal{D} bezeichnet. Anschließend wird für einen gegebenen Parameter $\theta \in (0, 1]$ durch Sortieren die kleinste Menge \mathcal{D}' bestimmt, so dass

$$(13.6) \quad \sum_{\vec{\lambda} \in \mathcal{D}'} 2^{2|\vec{j}(\vec{\lambda})|_{\infty}} \cdot |u_{\vec{\lambda}}|^2 \leq \theta \cdot \sum_{\vec{\lambda} \in \mathcal{D}} 2^{2|\vec{j}(\vec{\lambda})|_{\infty}} \cdot |u_{\vec{\lambda}}|^2$$

gilt. Der Faktor $2^{2|\vec{j}(\vec{\lambda})|_{\infty}}$ ergibt sich dabei aus dem Prädiktor und der Forderung, dass der Fehler bezüglich der H^1 -Norm minimiert wird.

Hat man so die Menge \mathcal{D}' bestimmt, so werden alle direkten Nachkommen zu diesen Ansatzfunktionen hinzugefügt. Weiterhin werden dementsprechend kleinstmögliche Räume \tilde{V}'_{ℓ} und eine Indexmenge \mathcal{J}' bestimmt, so dass der entsprechend Gleichung (13.1) konstruierte Ansatzraum $G_{\mathcal{J}'}$ sowohl den alten Ansatzraum $G_{\mathcal{J}}$ als auch die direkten Nachfahren der Funktionen in \mathcal{D}' enthält.

Diese heuristische Art der Verfeinerung wird oftmals im Zusammenhang mit dünnen Gittern angewandt und führt praktisch gesehen zu guten Ergebnissen (Bungartz und Griebel, 2004). Speziell wurde im vorliegenden Fall als Parameter $\theta = 0.4$ gewählt.

Führt man diesen Algorithmus im Falle des Heliums aus, so ergeben sich die in Tabelle 1 zusammengefassten Ergebnisse, die graphisch in Abbildung 2 dargestellt sind. Da für die Eigenwerte von Helium keine analytischen Ausdrücke bekannt sind, wurde als Referenzwert die in (Sims und Hagstrom, 2002) berechnete Näherung des kleinsten Eigenwerts von Helium ($\lambda_{\min} = -2.9037243770341195982999$) verwendet. Dort wurden zur Berechnung Ansatzfunktionen verwendet, die die Struktur der Wellenfunktion des Heliumatoms sehr gut wiedergeben, siehe auch (Hylleraas, 1929). Obwohl, wie gesagt, der exakte Wert nicht bekannt ist, geht man davon aus, dass dieser Wert bis zur achtzehnten Nachkommastelle exakt ist.

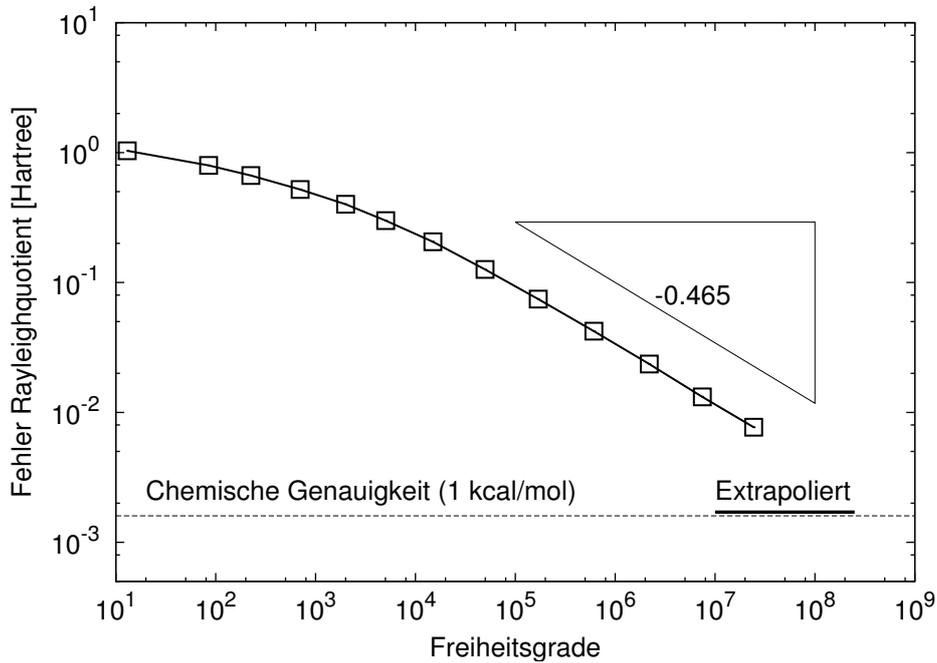


ABBILDUNG 2. Fehler des Rayleigh-Quotienten zum kleinsten Eigenwert des Helium Atoms in Abhängigkeit von den Freiheitsgraden. Als Referenz wurde $\lambda = 2.903724$ aus (Sims und Hagstrom, 2002) verwendet.

Aus dem der graphischen Darstellung des Rayleighquotienten in Abbildung 2 erkennt man, dass der Fehler im Eigenwert sich wie

$$(13.7) \quad \tilde{\lambda}_1 - \lambda_1 \sim n^{-\alpha}$$

verhält, wenn dabei n der Anzahl der Freiheitsgrade entspricht. Bestimmt man dabei den Wert α graphisch, so erhält man $\alpha \approx 0.45$. Eine gemischte Regularität von $s = 3/4$ im Sinne von Gleichung (10.6) liefert eine asymptotische Konvergenzrate im Eigenwert von $\alpha = 1/2$.

Das asymptotische Verhalten aus Gleichung (13.7) erlaubt, den Eigenwert für $n \rightarrow \infty$ zu extrapolieren. Dazu wird anhand der letzten drei Ergebnisse numerisch eine Schätzung der Konvergenzrate berechnet. Mit Hilfe dieser Rate kann dann aus den letzten beiden Ergebnissen die Extrapolation berechnet werden. Der dadurch erhaltene Wert ist sowohl in der Tabelle als auch in der Graphik aufgeführt.

Insgesamt erfüllen die Approximationen des kleinsten Eigenwertes jedoch nicht die chemische Genauigkeit, die bei etwa

$$1 \text{ kcal/mol} \approx 1.6 \text{ mHa}$$

liegt. Der extrapolierte Wert liegt dabei mit einem Fehler von 1.7 mHa in der Nähe dieser Schranke. Führt man anhand des Fehlerverhaltens aus Gleichung (13.7) die Entwicklung fort, so ist zu erwarten, dass mit ca. 10^9 Freiheitsgraden diese Schranke erreicht ist.

Reelle Interpolation

In diesem Anhang werden die Grundlagen der reellen Interpolationstheorie aufbauend auf dem K -Funktional zusammengefasst, wie sie von Peetre eingeführt wurde (Peetre, 1963b; Peetre, 1963a). Zur Übersicht und weiteren Literaturhinweisen siehe zum Beispiel (Bergh und Löfström, 1976; Butzer und Scherer, 1968). Diese Theorie wird dabei an verschiedenen Stellen verwendet, um Normäquivalenzen von gewichteten Waveletkoeffizienten zu gewichteten Sobolevräumen herzuleiten. Das Material beruht dabei auf der Monographie (Butzer und Scherer, 1968). Speziell im Kontext von Wavelets wird sie ebenfalls in (Cohen, 2003) erklärt.

Die Theorie der Interpolationsräume wird dazu verwendet Räume zu konstruieren, die in einem gewissen Sinne die Lücke zu schon vorhandenen Räumen ausfüllen. Die bekanntesten Beispiele sind dabei vielleicht der Raum der Hölder-stetigen Funktionen zum Exponenten α , der zwischen den Räumen der $\lfloor \alpha \rfloor$ - und $\lceil \alpha \rceil$ -mal stetig differenzierbaren Funktionen liegt. Weiterhin können mit Hilfe der Interpolationsräume auch Sobolevräume gebrochener Ordnung eingeführt werden.

Wir werden die K -Funktional Theorie hier jedoch nicht in voller Allgemeinheit beschreiben, sondern werden uns auf die Interpolation zwischen zwei Räumen beschränken, bei denen einer im anderen enthalten ist.

Dabei werden wir wie folgt vorgehen: Zuerst wird das K -Funktional für Banachräume $Y \subset X$ eingeführt und einige Eigenschaften bewiesen. Später wird mit dessen Hilfe eine Schar von intermediären Räume $[X, Y]_{\theta, q}$ mit $Y \subset [X, Y]_{\theta, q} \subset X$ für $q \in [1, \infty]$ und $0 < \theta < 1$ definiert werden. Diese Räume liegen somit zwischen X und Y .

Wir beginnen mit der Definition des K -Funktionals.

DEFINITION A.1. Seien zwei normierte Banachräume $Y \subset X$ mit Normen $\|\cdot\|_X$ bzw. $\|\cdot\|_Y$ gegeben, wobei Y in X stetig eingebettet ist. Das K -Funktional bezüglich X und Y ist durch

$$K : X \times \mathbb{R}^+ \rightarrow \mathbb{R}, \quad (f, t) \mapsto K(f, t) = \inf_{g \in Y} [\|f - g\|_X + t\|g\|_Y]$$

gegeben.

Das K -Funktional gibt also wieder, wie gut eine Funktion $f \in X$ durch eine Funktion $g \in Y$ approximiert werden kann, wobei die Norm von g als mit t gewichteter Strafterm hinzugezählt wird. Da für die Normen nach Voraussetzung $\|\cdot\|_X \lesssim \|\cdot\|_Y$ gilt misst dieser Term somit indirekt die Glattheit der zu approximierenden Funktion. Später wird dabei vor allem das Verhalten von $K(f, t)$ für $t \rightarrow 0$ eine Rolle spielen.

Ohne Einschränkung der Allgemeinheit kann angenommen werden, dass die Konstante der Einbettung eins ist, d.h. dass

$$\|f\|_Y \leq \|f\|_X$$

gilt.

LEMMA A.2. Sei $f \in Y$ und $s, t \in \mathbb{R}$. Das K -Funktional besitzt folgende Eigenschaften:

(1) $K(f, t) = \|f\|_X$ für $t \geq 1$.

$$(2) \quad t/s \cdot K(f, s) \leq K(f, t) \leq K(f, s), \text{ für } t \leq s \text{ und } s > 0.$$

Speziell ist damit $K(f, t)$ in t monoton wachsend.

BEWEIS. Zuerst wird der zweite Punkte gezeigt werden. Sei dazu $t \leq s$ wie angegeben. Dann gilt

$$K(f, t) = \inf_{g \in Y} \|f - g\|_X + t\|g\|_Y \leq \inf_{g \in Y} \|f - g\|_X + s\|g\|_Y = K(f, s).$$

In die andere Richtung folgt die Behauptung aus

$$K(f, t) = \inf_{g \in Y} \|f - g\|_X + t\|g\|_Y = \frac{t}{s} \inf_{g \in Y} \frac{s}{t} \|f - g\|_X + s\|g\|_Y \geq \frac{t}{s} K(f, s),$$

da $s/t \geq 1$ gilt.

Der erste Punkt wird zuerst für den Spezialfall $t = 1$ bewiesen. Es gilt

$$\|f\|_X \leq \|f - g\|_X + \|g\|_X \leq \|f - g\|_X + 1 \cdot \|g\|_Y,$$

wobei für die zweite Ungleichung die stetige Einbettung benutzt wurde. Bildet man nun das Infimum über g , so ergibt sich $\|f\|_X \leq K(f, 1)$. In die andere Richtung gilt ebenfalls durch die Dreiecksungleichung

$$K(f, 1) \leq \|f - 0\|_X + 1 \cdot \|0\|_Y = \|f\|_X.$$

Zusammen ergibt sich die Identität $\|f\|_X = K(f, 1)$.

Der allgemeine Fall $t \geq 1$ folgt aus der Monotonie des K -Funktionals und der Abschätzung

$$K(f, t) = \inf_{g \in Y} \|f - g\|_X + t\|g\|_Y \leq \|f - 0\|_X + t\|0\|_Y = \|f\|_X.$$

□

Mit Hilfe des K -Funktionals können nun Räume konstruiert werden, die zwischen X und Y liegen. Sie werden durch die Geschwindigkeit charakterisiert mit denen das K -Funktional für $t \rightarrow 0$ abfällt.

SATZ A.3. Für $f \in X$, $q \in [1, \infty]$ und $0 < \theta < 1$ definiere

$$(A.1) \quad \|f\|_{[X, Y]_{\theta, q}}^q = \int_0^\infty [t^{-\theta} K(f, t)]^q \frac{dt}{t},$$

wobei für $q = \infty$ das Integral durch die Supremumsbildung zu ersetzen ist. Dann ist durch

$$[X, Y]_{\theta, q} = \{f \in X \mid \|f\|_{[X, Y]_{\theta, q}} < \infty\}$$

mit der Norm $\|\cdot\|_{[X, Y]_{\theta, q}}$ ein Banachraum gegeben.

Ein Beweis dieser Aussage kann z.B. in der Monographie (Butzer und Scherer, 1968) gefunden werden.

Im vorliegenden Fall wird vor allem der Fall $q = 2$ benötigt. Speziell für diesen Fall kann man ebenfalls die Interpolationsnorm mit einem leicht abgeänderten K -Funktional definieren. Setze dazu

$$\tilde{K}^2(f, t) = \inf_{g \in Y} \|f - g\|_X^2 + t^2 \|g\|_Y^2.$$

Dann gilt

$$\tilde{K}^2(f, t) \sim K^2(f, t)$$

für alle t und f . Somit ist die analog zu Gleichung (A.1) definierte Norm unter Verwendung von \tilde{K} äquivalent zu $\|\cdot\|_{[X, Y]_{\theta, 2}}$.

Eine wichtige Eigenschaft der Interpolationsräume ist durch folgenden Satz gegeben:

SATZ A.4. Sei $q \in [1, \infty]$, $0 < \theta < 1$ und für $i = 1, 2$ Räume $Y_i \subset X_i$ gegeben, so dass die Voraussetzungen für die Definition A.1 des K -Funktionals erfüllt sind. Weiterhin sei ein stetiger linear Operator T als Abbildung $X_1 \rightarrow X_2$ und $Y_1 \rightarrow Y_2$ gegeben. Dann ist die Abbildung

$$T : [X_1, Y_1]_{\theta, q} \rightarrow [X_2, Y_2]_{\theta, q}$$

bezüglich der Interpolationsnormen ebenfalls stetig. Für die Norm gilt die Abschätzung

$$\|T\|_{[X_1, Y_1]_{\theta, q} \rightarrow [X_2, Y_2]_{\theta, q}} \leq \|T\|_{X_1 \rightarrow X_2}^{1-\theta} \cdot \|T\|_{Y_1 \rightarrow Y_2}^{\theta}.$$

BEWEIS. Es gilt für $x \in X_1$

$$\begin{aligned} K(t, Tx, X_2, Y_2) &= \inf_{y \in Y_2} \|Tx - y\|_{X_2} + t\|y\|_{Y_2} \leq \inf_{y \in Y_1} \|Tx - Ty\|_{X_2} + t\|Ty\|_{Y_2} \\ &\leq \inf_{y \in Y_1} \|T\|_{X_1 \rightarrow X_2} \|x - y\|_{X_1} + t \cdot \|T\|_{Y_1 \rightarrow Y_2} \|y\|_{Y_1} \\ &\leq \|T\|_{X_1 \rightarrow X_2} K\left(\frac{\|T\|_{Y_1 \rightarrow Y_2}}{\|T\|_{X_1 \rightarrow X_2}} t, x, X_1, Y_1\right) \end{aligned}$$

nach Ausklammern der Norm von T . Bildet man nun durch das Integral die Interpolationsnorm, so kann auf diese Weise nun die Norm $\|Tx\|_{[X_2, Y_2]_{\theta, q}}$ durch $\|x\|_{[X_1, Y_1]_{\theta, q}}$ abgeschätzt werden. Das Ergebnis ergibt sich dabei durch Substitution. \square

Tensorräume und gemischte Ableitungen

In diesem Kapitel werden Tensorprodukte und Schnitte von Hilberträumen eingeführt und die zentralen Aussagen zusammengefasst. Die Darstellung der Tensorräume basiert dabei auf den Monographien (Weidmann, 2000; Reed und Simon, 1980). Der Fall von Banachräumen wird im Buch (Light und Cheney, 1985) behandelt. Die Behandlung von Sobolevräumen gemischter Ordnung als Schnitt von Tensorprodukträumen wird dabei auch in (Griebel und Oswald, 1995; Griebel und Knapik, 2000) verwendet.

Gegeben seien zwei Hilberträume $(X, \langle \cdot, \cdot \rangle_X)$ und $(Y, \langle \cdot, \cdot \rangle_Y)$. Im Folgenden wollen wir Ausdrücke der Form $x \otimes y$ mit $x \in X$ und $y \in Y$ definieren so dass folgende Rechenregeln gelten: für alle $x, x' \in X$, $y \in Y$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ gelte

$$\begin{aligned}(x + x') \otimes y &= x \otimes y + x' \otimes y \\ (\alpha x) \otimes y &= \alpha x \otimes y\end{aligned}$$

und analoge Ausdrücke ebenso für den zweiten Faktor.

Die Definition wird über Äquivalenzklassen auf dem Raum der formalen Linearkombinationen auf $X \times Y$,

$$F(X, Y) = \left\{ \sum_{k=1}^N a_k(x_k, y_k) \mid a_k \in \mathbb{R}, x_k \in X, y_k \in Y, k = 1, \dots, N \right\}$$

geführt. Auf $F(X, Y)$ kann direkt eine Addition sowie die Multiplikation mit einem Skalar definiert werden.

Jedes Element $u = \sum_{k=1}^N a_k(x_k, y_k)$ aus $F(X, Y)$ induziert eine Abbildung

$$\Phi_u : X \times Y \rightarrow \mathbb{R}, \quad (x, y) \mapsto \sum_{k=1}^N a_k \langle x, x_k \rangle_X \cdot \langle y, y_k \rangle_Y$$

Zwei Elemente $u, v \in F(X, Y)$ heißen nun äquivalent $u \sim v$, falls für die von u und v induzierten Abbildungen $\Phi_u = \Phi_v$ gilt.

Das *algebraische Tensorprodukt* ist dann als Quotientenraum

$$X \otimes_a Y = F(X, Y) / \sim$$

definiert. Auf $X \otimes_a Y$ ist durch

$$\left\langle \sum_{k=1}^N a_k(x_k, y_k), \sum_{l=1}^{N'} a'_l(x'_l, y'_l) \right\rangle_{X \otimes_a Y} = \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^{N'} a_k a'_l \langle x_k, x'_l \rangle_X \cdot \langle y_k, y'_l \rangle_Y$$

ein Skalarprodukt gegeben.

DEFINITION B.1. Seien $(X, \langle \cdot, \cdot \rangle_X)$ und $(Y, \langle \cdot, \cdot \rangle_Y)$ zwei Hilberträume und durch $X \otimes_a Y$ das algebraische Tensorprodukt wie oben gegeben. Die Vervollständigung von $X \otimes_a Y$ bezüglich der durch das Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle_{X \otimes_a Y}$ induzierten Norm wird als *Tensorprodukt* $X \otimes Y$ von X und Y bezeichnet.

Operatoren S und T auf X bzw. Y können zu Operatoren auf $X \otimes Y$ kombiniert werden. Für jede endliche Linearkombination setze

$$(S \otimes T) \left(\sum_{k=1}^N a_k x_k \otimes y_k \right) = \sum_{k=1}^N a_k (Sx_k) \otimes (Ty_k).$$

Man kann zeigen, dass die Definition auf den Äquivalenzklassen wohldefiniert ist. Einen Operator auf $X \otimes Y$ erhält man nun durch Erweiterung. Der folgende Satz beschäftigt sich mit der Frage, ob aus der Stetigkeit der Operatoren S und T auch die Stetigkeit von $S \otimes T$ folgt.

SATZ B.2. *Seien für $i = 1, 2$ Hilberträume $(X_i, \langle \cdot, \cdot \rangle_{X_i})$ und $(Y_i, \langle \cdot, \cdot \rangle_{Y_i})$ gegeben. Setze $U = X_1 \otimes X_2$ und $V = Y_1 \otimes Y_2$ mit der üblichen Norm. Weiterhin seien beschränkte Operatoren $T_i : X_i \rightarrow Y_i$ gegeben. Dann gilt*

$$\|T_1 \otimes T_2\|_{U \rightarrow V} = \|T_1\|_{X_1 \rightarrow Y_1} \cdot \|T_2\|_{X_2 \rightarrow Y_2}.$$

BEWEIS. Sei eine endliche Linearkombination

$$u = \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} x_{n_1}^{(1)} \otimes x_{n_2}^{(2)}$$

gegeben, wobei für $i = 1, 2$ jeweils die Vektoren $\{x_k^{(i)} \mid k = 1, \dots, N_i\}$ ohne Einschränkung der Allgemeinheit linear unabhängig gewählt werden können. Für $i = 1, 2$ definiere die Diskretisierungsmatrizen

$$M_i = (\langle x_j^{(i)}, x_k^{(i)} \rangle_{X_i})_{k,j=1,\dots,N_i}, \quad S_i = (\langle T_i x_j^{(i)}, T_i x_k^{(i)} \rangle_{Y_i})_{k,j=1,\dots,N_i}.$$

Die Matrizen M_1 und M_2 sind als Gramsche Matrix symmetrisch positiv definit, während S_1 und S_2 symmetrisch positiv semidefinit sind. Aus dem verallgemeinerten Eigenwertproblem $Sc = \mu Mc$ folgt, dass für $i = 1, 2$ auf $\text{span}\{x_k^{(i)} \mid k = 1, 2, \dots, N_i\}$ eine bezüglich des Skalarprodukts auf X_i orthonormale Basis von Vektoren $\{w_k^{(i)} \mid k = 1, 2, \dots, N_i\}$ gibt, so dass

$$\langle w_j^{(i)}, w_k^{(i)} \rangle_{X_i} = \delta_{j,k}, \quad \langle T_i w_j^{(i)}, T_i w_k^{(i)} \rangle_{Y_i} = \delta_{j,k} \mu_j^{(i)},$$

Weiterhin gilt

$$(B.1) \quad 0 \leq \mu_j^{(i)} \leq \|T_i\|_{X_i \rightarrow Y_i}^2 \quad \text{für alle } j = 1, \dots, N_i.$$

Somit kann u in dieser neuen Basis als

$$u = \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} c_{n_1 n_2} w_{n_1}^{(1)} \otimes w_{n_2}^{(2)}$$

mit Koeffizienten $c_{n_1 n_2}$ geschrieben werden. Nutzt man nun die Orthogonalität der Basisvektoren aus, so erhält man

$$\|(T_1 \otimes T_2) u\|_V^2 = \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} c_{n_1 n_2}^2 \mu_{n_1}^{(1)} \mu_{n_2}^{(2)} \quad \text{und} \quad \|u\|_U^2 = \sum_{n_1=1}^{N_1} \sum_{n_2=1}^{N_2} c_{n_1 n_2}^2.$$

Somit folgt mit Hilfe von Gleichung (B.1) und der Dichtheit der endlichen Linearkombinationen die Abschätzung

$$\|T_1 \otimes T_2\|_{U \rightarrow V} \leq \|T_1\|_{X_1 \rightarrow Y_1} \cdot \|T_2\|_{X_2 \rightarrow Y_2}.$$

Die andere Richtung folgt aus

$$\|(T_1 \otimes T_2) x^{(1)} \otimes x^{(2)}\|_V = \|T_1 x^{(1)}\|_{Y_1} \cdot \|T_2 x^{(2)}\|_{Y_2}$$

und der Tatsache, dass für jedes $\varepsilon > 0$ und $i = 1, 2$ ein Element $x^{(i)}$ mit $\|x^{(i)}\|_{X_i} = 1$ existiert, so dass $\|T_i x^{(i)}\|_{Y_i} = \|T_i\|_{X_i \rightarrow Y_i} - \varepsilon$ gilt. \square

Mit Hilfe des letzten Satzes können nun Normäquivalenzen hergeleitet werden. Dabei heißen zwei Normen $\|\cdot\|$ und $\|\!\| \cdot \|\!$ auf dem Raum X äquivalent wenn für alle Elemente $x \in X$

$$\mu_{\min} \|\!\| x \|\!\| \leq \|x\| \leq \mu_{\max} \|\!\| x \|\!\|$$

mit Konstanten μ_{\min}, μ_{\max} unabhängig von x gilt. Das Verhältnis $\kappa = \mu_{\max}/\mu_{\min}$ wird dabei die *Kondition* der Normäquivalenz genannt.

KOROLLAR B.3. *Seien auf dem Hilberträumen X und Y jeweils zwei durch Skalarprodukte induzierte äquivalente Normen gegeben, das heißt es gelte*

$$\|x\|_X \sim \|\!\| x \|\!\|_X, \quad \text{und} \quad \|y\|_Y \sim \|\!\| y \|\!\|_Y,$$

für alle $x \in X$ und $y \in Y$. Die Kondition der Normäquivalenz werde mit κ_X und κ_Y bezeichnet. Dann gilt für den Tensorproduktraum

$$\|u\|_{X \otimes Y} \sim \|\!\| u \|\!\|_{X \otimes Y},$$

für alle $u \in X \otimes Y$, wobei die Normen auf den Tensorprodukträumen kanonisch gegeben sind. Die Kondition der Normäquivalenz ist durch $\kappa_{X \otimes Y} = \kappa_X \cdot \kappa_Y$ gegeben.

BEWEIS. Betrachte dazu den Tensorproduktoperator der Identitäten

$$\text{Id}_X : (X, \|\cdot\|_X) \rightarrow (X, \|\!\| \cdot \|\!\|_X)$$

und der analog definierten Identität Id_Y , sowie dessen Inverse. Dann folgt die Behauptung aus

$$\text{Id}_{X \otimes Y} = \text{Id}_X \otimes \text{Id}_Y$$

und Satz B.2. \square

Weiterhin wird ebenfalls der Schnitt zweier Hilberträume benötigt.

LEMMA B.4. *Seien $(X, \|\cdot\|_X)$ und $(Y, \|\cdot\|_Y)$ zwei Hilberträume. Der nichtleere Schnitt $X \cap Y$ wird mit dem Skalarprodukt*

$$\langle f, g \rangle_{X \cap Y} := \langle f, g \rangle_X + \langle f, g \rangle_Y$$

zum Hilbertraum.

Die Normäquivalenzen können hier einfach bestimmt werden.

KOROLLAR B.5. *Seien auf dem Hilberträumen X und Y jeweils zwei durch Skalarprodukte induzierte äquivalente Normen gegeben, das heißt es gelte*

$$\|x\|_X \sim \|\!\| x \|\!\|_X, \quad \text{und} \quad \|y\|_Y \sim \|\!\| y \|\!\|_Y,$$

für alle $x \in X$ und $y \in Y$ mit den Konstanten $\mu_{\max/\min}^{(X/Y)}$. Dann gilt auf $X \cap Y$ folgende Normäquivalenz

$$\|u\|_{X \cap Y}^2 := \|u\|_X^2 + \|u\|_Y^2 \sim \|\!\| u \|\!\|_X^2 + \|\!\| u \|\!\|_Y^2 =: \|\!\| u \|\!\|_{X \cap Y}^2,$$

wobei $u \in X \cap Y$. Die Kondition der Normäquivalenz ist dabei durch

$$\kappa_{X \cap Y} \leq \frac{\max(\mu_{\max}^{(X)}, \mu_{\max}^{(Y)})}{\min(\mu_{\min}^{(X)}, \mu_{\min}^{(Y)})}.$$

gegeben.

BEWEIS. Es gilt in die eine Richtung

$$\|u\|_X^2 + \|u\|_Y^2 \leq (\mu_{\max}^{(X)})^2 \|u\|_X^2 + (\mu_{\max}^{(Y)})^2 \|u\|_Y^2$$

für alle $u \in X \cap Y$. Abschätzung der Faktoren $\mu_{\max}^{(X/Y)}$ liefert die Behauptung. Die andere Richtung folgt analog. \square

Literaturverzeichnis

- Adams, R. A. (1975). *Sobolev spaces*. New York: Academic Press.
- Agmon, S. (1981). *Lectures on the Exponential Decay of Solutions of Second-Order Elliptic Operators*. Princeton University Press.
- Arias, T. A. (1999). Multiresolution analysis of electronic structure: semicardinal and wavelet bases. *Reviews of Modern Physics*, 71, 267–311.
- Babenko, K. (1960). Approximation by trigonometric polynomials in a certain class of periodic functions of several variables. *Sov. Math., Dokl.*, 1, 672–675.
- Babuška, I. und Osborn, J. (1989). Finite element-Galerkin approximation of the eigenvalues and eigenvectors of selfadjoint problems. *Math. Comput.*, 52, 275–297.
- Babuška, I. und Osborn, J. (1991). Eigenvalue problems. In *Handbook of Numerical Analysis*, Band 2 (S. 641–787). Amsterdam: Elsevier-North Holland.
- Balder, R. (1994). *Adaptive Verfahren für elliptische und parabolische Differentialgleichungen auf dünnen Gittern*. Doktorarbeit, TU München.
- Balder, R. und Zenger, C. (1996). The Solution of Multidimensional Real Helmholtz Equations on Sparse Grids. *SIAM J. Sci. Comp.*, 17(3), 631–646.
- Bellman, R. (1957). *Dynamic Programming*. Princeton, NJ.: Princeton University Press.
- Bergh, J. und Löfström, J. (1976). *Interpolation Spaces*. Springer.
- Beylkin, G. und Mohlenkamp, M. J. (2002). Numerical operator calculus in higher dimensions. *PNAS*, 99, 10246–10251.
- Beylkin, G. und Mohlenkamp, M. J. (2004). Algorithms for numerical analysis in high dimensions. *SIAM J. Sc. Comput.*
- Beylkin, G., Mohlenkamp, M. J., und Pérez, F. (2008). Approximating a wavefunction as an unconstrained sum of Slater determinants. *Journal of Mathematical Physics*, 49(3), 032107.
- Born, M. und Oppenheimer, B. (1927). Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 84, 457–484.
- Braess, D. (2003). *Finite Elemente. Theorie, schnelle Löser und Anwendungen in der Elastizitätstheorie*. Berlin: Springer, 3. Ausgabe.
- Brenner, S. C. und Scott, R. L. (2008). *The mathematical theory of finite element methods*, Band 15 der Reihe *Texts in Applied Mathematics*. New York: Springer, 3. Ausgabe.
- Bungartz, H.-J. (1992). *Dünne Gitter und deren Anwendung bei der adaptiven Lösung der dreidimensionalen Poisson-Gleichung*. Doktorarbeit, TU München.
- Bungartz, H.-J. (1998). *Finite Elements of Higher Order on Sparse Grids*. Habilitationsschrift, Fakultät für Informatik, TU München.
- Bungartz, H.-J. und Griebel, M. (1999). A note on the complexity of solving Poisson's equation for spaces of bounded mixed derivatives. *J. Complexity*, 15, 167–199.
- Bungartz, H.-J. und Griebel, M. (2004). Sparse grids. *Acta Numerica*, 13, 147–269.
- Butzer, P. L. und Scherer, K. (1968). *Approximationsprozesse und Interpolationsmethoden*. Mannheim: Bibliographisches Institut.
- Chatelin, F. (1983). *Spectral approximation of linear operators*. Computer Science and Applied Mathematics. New York: Academic Press.
- Chui, C. K. und Wang, J. Z. (1992). On compactly supported spline wavelets and a duality principle. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 330, 903–916.
- Cohen, A. (2003). *Numerical analysis of wavelet methods*. Amsterdam: Elsevier.
- Cohen, A., Dahmen, W., und DeVore, R. (2001). Adaptive wavelet methods for elliptic operator equations: Convergence rates. *Math. Comput.*, 70(233), 27–75.
- Cohen, A., Daubechies, I., und Feauveau, J.-C. (1992). Biorthogonal bases of compactly supported wavelets. *Commun. Pure Appl. Math.*, 45(5), 485–560.
- Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., und Laloe, F. (1977). *Quantum Mechanics I/II*. Wiley and Sons.
- Condon, E. U. (1930). The theory of complex spectra. *Phys. Rev.*, 36(7), 1121–1133.
- Dahmen, W., Rohwedder, T., Schneider, R., und Zeiser, A. (2008). Adaptive eigenvalue computation - complexity estimates. *Numer. Math.*, 110, 277–312.
- Daubechies, I. (1988). Orthonormal bases of compactly supported wavelets. *Commun. Pure Appl. Math.*, 41(7), 909–996.

- Daubechies, I. (1992). *Ten lectures on wavelets*. Philadelphia: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Daubechies, I. (1996). Where do wavelets come from? -a personal point of view. *Proc. IEEE*, 84(4), 510–513.
- DeVore, R. A. (1998). Nonlinear approximation. *Acta Numerica*, 7, 51–150.
- DeVore, R. A., Konyagin, S. V., und Temlyakov, V. N. (1998). Hyperbolic wavelet approximation. *Constr. Approx.*, 14(1), 1–26.
- Donovan, G. C., Geronimo, J. S., und Hardin, D. P. (1996). Intertwining multiresolution analyses and the construction of piecewise-polynomial wavelets. *Siam J. Math. Anal.*, 27, 1791–1815.
- Euler, L. (1753). De partitione numerorum. *Novi commentarii academiae scientiarum Petropolitanae*, 3, 125–169.
- Feuersänger, C. (2005). Dünngitterverfahren für hochdimensionale elliptische partielle Differentialgleichungen. Diplomarbeit, Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn.
- Flad, H., Hackbusch, W., Kolb, D., und Schneider, R. (2002). Wavelet approximation of correlated wave functions. I. Basics. *J. Chem. Phys.*, 116, 9641–9657.
- Flad, H.-J., Hackbusch, W., Luo, H., und Kolb, D. (2004). *Toward diagrammatic multiresolution analysis for electron correlations*. Technical report, MPI Leipzig.
- Flad, H.-J., Hackbusch, W., und Schneider, R. (2006). Best N -term approximation in electronic structure calculations. I: One-electron reduced density matrix. *ESAIM, Math. Model. Numer. Anal.*, 40(1), 49–61.
- Flad, H.-J., Hackbusch, W., und Schneider, R. (2007). Best N -term approximation in electronic structure calculations. II: Jastrow factors. *ESAIM, Math. Model. Numer. Anal.*, 41(2), 261–279.
- Flad, H.-J. und Schneider, R. (2010). s^* -compressibility of discrete Hartree-Fock equations. In Vorbereitung.
- Flad, H.-J., Schneider, R., und Schulze, B.-W. (2008). Asymptotic regularity of solutions to Hartree-Fock equations with Coulomb potential. *Math. Methods Appl. Sci.*, 31(18), 2172–2201.
- Fournais, S., Hoffmann-Ostenhof, M., Hoffmann-Ostenhof, T., und Østergaard Sørensen, T. (2005). Sharp regularity results for coulombic many-electron wave functions. *Comm. Math. Phys.*, 255, 183–227.
- Friesecke, G. (2003). The multiconfiguration equations for atoms and molecules: charge quantization and existence of solutions. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 169(1), 35–71.
- Friesecke, G. und Goddard, B. D. (2009). Explicit large nuclear charge limit of electronic ground states for Li, Be, B, C, N, O, F, Ne and basic aspects of the periodic table. *SIAM J. Math. Analysis*, 41, 631–664.
- Garcke, J. (1998). Berechnung von Eigenwerten der stationären Schrödingergleichung mit der Kombinations-technik. Diplomarbeit, Institut für Angewandte Mathematik, Universität Bonn.
- Garcke, J. (2008). An optimised sparse grid combination technique for eigenproblems. In *Proceedings of ICIAM 2007*, Band 7 der Reihe *PAMM* (S. 1022301–1022302).
- Garcke, J. und Griebel, M. (2000). On the computation of the eigenproblems of hydrogen and helium in strong magnetic and electric fields with the sparse grid combination technique. *Journal of Computational Physics*, 165(2), 694–716.
- Genovese, L., Neelov, A., Goedecker, S., Deutsch, T., Ghasemi, S. A., Willand, A., Caliste, D., Zilberberg, O., Rayson, M., Bergman, A., und Schneider, R. (2008). Daubechies wavelets as a basis set for density functional pseudopotential calculations. *The Journal of Chemical Physics*, 129(1), 014109.
- Godunov, S., Ogneva, V., und Prokopov, G. (1976). On the convergence of the modified method of steepest descent in the calculation of eigenvalues. *Am. Math. Soc., Translat., II. Ser.*, 105, 111–116.
- Griebel, M. und Hamaekers, J. (2006). A wavelet based sparse grid method for the electronic Schrödinger equation. In M. Sanz-Solé, J. Soria, J. Varona, & J. Verdera (Hrsg.), *Proceedings of the International Congress of Mathematicians*, Band III (S. 1473–1506). Madrid: European Mathematical Society.
- Griebel, M. und Hamaekers, J. (2007). Sparse grids for the Schrödinger equation. *Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 41(2), 215–247.
- Griebel, M. und Hamaekers, J. (2009). Tensor product multiscale many-particle spaces with finite-order weights for the electronic Schrödinger equation. Preprint.
- Griebel, M. und Knapek, S. (2000). Optimized tensor-product approximation spaces. *Constr. Approx.*, 16(4), 525–540.
- Griebel, M. und Oeltz, D. (2007). A Sparse Grid Space-Time Discretization Scheme for Parabolic Problems. *Computing*, 81(1), 1–34.
- Griebel, M. und Oswald, P. (1995). Tensor product type subspace splittings and multilevel iterative methods for anisotropic problems. *Adv. Comput. Math.*, 4, 171–206.
- Gustafson, S. J. und Sigal, I. M. (2003). *Mathematical concepts of quantum mechanics*. Berlin: Springer.
- Hackbusch, W. (2006). Approximation of $1/\|x - y\|$ by exponentials for wavelet applications. *Computing*, 76(3-4), 359–366.
- Hamaekers, J. (2009). *Tensor Product Multiscale Many-Particle Spaces with Finite-Order Weights for the Electronic Schrödinger Equation*. Doktorarbeit, Institut für Numerische Simulation, Universität Bonn.
- Harbrecht, H., Schneider, R., und Schwab, C. (2008). Multilevel frames for sparse tensor product spaces. *Numer. Math.*, 110(2), 199–220.
- Hardy, G. und Ramanujan, S. (1918). Asymptotic formulae in combinatory analysis. *Proc. Lond. Math. Soc.*, 17, 75–115.

- Haroske, D. D. und Triebel, H. (2008). *Distributions, Sobolev spaces, elliptic equations*. Textbooks in Mathematics. Zürich: European Mathematical Society.
- Heitler, W. und London, F. (1927). Wechselwirkung neutraler Atome und homöopolare Bindungen nach der Quantenmechanik. *Z. Phys.*, 44, 455–472.
- Helgaker, T., Jørgensen, P., und Olsen, J. (2000). *Molecular Electronic-Structure Theory*. Chichester: Wiley.
- Hilgenfeldt, S., Balder, R., und Zenger, C. (1995). *Sparse Grids: Applications to Multidimensional Schrödinger Problems*. Technical report, TU München.
- Hislop, P. und Sigal, I. (1996). *Introduction to spectral theory. With applications to Schrödinger operators*. Springer-Verlag.
- Hopf, E. (1931). Über den funktionalen, insbesondere den analytischen Charakter der Lösungen elliptischer Differentialgleichungen zweiter Ordnung. *Math. Z.*, 34, 194–233.
- Hunziker, W. (1966). On the spectra of Schrödinger multiparticle Hamiltonians. *Helv. Phys. Acta*, 39, 451–462.
- Hunziker, W. und Sigal, I. (2000). The quantum N -body problem. *Journ. Math. Phys.*, 41, 3448–35100.
- Hylleraas, E. A. (1929). Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustand, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium. *Z. Physik*, 54, 347.
- Izuki, M. und Sawano, Y. (2009). Wavelet bases in the weighted Besov and Triebel-Lizorkin spaces with A_p^{loc} -weights. *Journal of Approximation Theory*, 161(2), 656–673.
- Kato, T. (1951a). Fundamental properties of hamiltonian operators of Schrödinger type. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 70, 195–211.
- Kato, T. (1951b). On the existence of solutions of the helium wave function. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 70, 212–218.
- Kato, T. (1957). On the eigenfunctions of many-particle systems in quantum mechanics. *Comm. Pure Appl. Math.*, 10, 151–177.
- Keinert, F. (2004). *Wavelets and multiwavelets*. Boca Raton: CRC.
- Knyazev, A. und Neymeyr, K. (2009). Gradient flow approach to geometric convergence analysis of preconditioned eigensolvers. *SIAM J. Matrix Analysis*, 31, 621–628.
- Knyazev, A. V. (2001). Toward the optimal preconditioned eigensolver: Locally optimal block preconditioned conjugate gradient method. *SIAM J. Sci. Comput.*, 23(2), 517–541.
- Knyazev, A. V. und Osborn, J. E. (2006). New a priori FEM error estimates for eigenvalues. *SIAM J. Numer. Anal.*, 43(6), 2647–2667.
- Königsberger, K. (2001). *Analysis 1*. Berlin: Springer.
- Königsberger, K. (2004). *Analysis 2*. Berlin: Springer.
- Korobov, N. (1957). Approximate calculation of repeated integrals by number-theoretical methods (russisch). *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 115, 1062–1065.
- Korobov, N. (1959). Approximate calculation of repeated integrals (russisch). *Dokl. Akad. Nauk. SSSR*, 124, 1207–1210.
- Kozlov, V. A., Maz'ya, V. G., und Rossmann, J. (1997). *Elliptic Boundary Value Problems in Domains with Point Singularities*. American Mathematical Society.
- Kreusler, H.-C. (2010). *Über die Regularität der Schrödingergleichung*. Doktorarbeit, TU Berlin. In Vorbereitung.
- Kufner, A. (1985). *Weighted Sobolev spaces. Licensed ed.* Chichester: John Wiley & Sons.
- Kufner, A., John, O., und Fučík, S. (1977). *Function spaces*. Leyden: Noordhoff International Publishing.
- Kutzelnigg, W. und Klopper, W. (1991). Wave functions with terms linear in the interelectronic coordinates to take care of the correlation cusp. I. General theory. *J. Chem. Phys.*, 24, 1986–2001.
- Le Bris, C., Hrsg. (2003). *Computational chemistry*, Band 10 der Reihe *Handbook of Numerical Analysis*. Amsterdam: North-Holland.
- Le Bris, C. (2005). Computational chemistry from the perspective of numerical analysis. *Acta Numerica*, (S. 363–444).
- Le Bris, C. und Lions, P.-L. (2005). From atoms to crystals: a mathematical journey. *Bull. Am. Math. Soc., New Ser.*, 42(3), 291–363.
- Lieb, E. H. und Simon, B. (1977). The Hartree-Fock theory for Coulomb systems. *Comm. Math. Phys.*, 53(3), 185–194.
- Light, W. und Cheney, E. (1985). *Approximation theory in tensor product spaces*, Band 1169 der Reihe *Lecture Notes in Mathematics*. Berlin: Springer-Verlag.
- Löwdin, P.-O. (1955). Quantum Theory of Many-Particle Systems. I. Physical Interpretations by Means of Density Matrices, Natural Spin-Orbitals, and Convergence Problems in the Method of Configurational Interaction. *Phys. Rev.*, 97(6), 1474–1489.
- Mallat, S. (1999). *A wavelet tour of signal processing*. San Diego: Academic Press, 2. Ausgabe.
- Mallat, S. G. (1989). Multiresolution approximations and wavelet orthonormal bases of $L^2(\mathbb{R})$. *Trans. Am. Math. Soc.*, 315(1), 69–87.
- Messiah, A. (1962/1963). *Quantum Mechanics: Vol 1 and Vol 2*. Wiley & Sons.
- Neymeyr, K. (2001). A hierarchy of preconditioned eigensolvers for elliptic differential operators. Habilitationsschrift Universität Tübingen.

- Niedermeier, A. (1999). Implementational aspects of prewavelet sparse grid methods. In C.-H. Lai, P. Bjoerstad, M. Cross, & O. Widlund (Hrsg.), *Eleventh international Conference of Domain Decomposition Methods*. Nitsche, P.-A. (2004). *Sparse Tensor Product Approximation of Elliptic Problems*. Doktorarbeit, ETH Zürich.
- Parlett, B. N. (1980). *The symmetric eigenvalue problem*. Computational Mathematics. New Jersey: Prentice-Hall.
- Peetre, J. (1963a). A theory of interpolation of normed spaces. *Notes Universade de Brasilia*.
- Peetre, J. (1963b). Nouvelles propriétés d'espaces d'interpolation. *C. R. Acad. Sci., Paris*, 256, 1424–1426.
- Reed, M. und Simon, B. (1978). *Methods of modern mathematical physics. IV: Analysis of operators*. New York: Academic Press.
- Reed, M. und Simon, B. (1980). *Methods of modern mathematical physics. I: Functional analysis. Rev. and enl. ed.* New York: Academic Press.
- Rohwedder, T., Schneider, R., und Zeiser, A. (2010). Perturbed preconditioned inverse iteration for operator eigenvalue problems with applications to adaptive wavelet discretization. Erscheint in *Adv. Comp. Math.* (2010).
- Roos, B. (1972). A new method for large-scale CI calculations. *Chemical Physics Letters*, 15(2), 153–159.
- Rychkov, V. S. (2001). Littlewood-Paley Theory and Function Spaces with A_p^{loc} Weights. *Math. Nachr.*, 224, 145–180.
- Samokish, B. (1958). The steepest descent method for an eigenvalue problem with semi-bounded operators. *Izvestiya Vuzov, Math.*, 5, 105–114. (In Russisch).
- Schmeisser, H.-J. und Triebel, H. (1987). *Topics in Fourier analysis and function spaces*. Chichester: John Wiley & Sons.
- Schneider, R. (2009). Analysis of the projected coupled cluster method in electronic structure calculation. *Numer. Math.*, 113(3), 433–471.
- Schott, T. (1998). Function Spaces with Exponential Weights I. *Mathematische Nachrichten*, 189, 221–242.
- Schrödinger, E. (1926). Quantisierung als Eigenwertproblem. *Ann. der Physik*, 79, 361–376.
- Schwab, C. und Stevenson, R. (2008). Adaptive wavelet algorithms for elliptic PDE's on product domains. *Math. Comput.*, 77(261), 71–92.
- Schwab, C. und Todor, R.-A. (2003). Sparse finite elements for elliptic problems with stochastic loading. *Numer. Math.*, 95(4), 707–734.
- Simon, B. (2000). Schrödinger operators in the twentieth century. *Journ. Math. Phys.*, 41, 3523–3555.
- Sims, J. S. und Hagstrom, S. A. (2002). High-precision hy-ci variational calculations for the ground state of neutral helium and helium-like ions. *International Journal of Quantum Chemistry, Volume 90, Issue 6*, 90, 1600–1609.
- Sloan, I. H., Wang, X., und Woźniakowski, H. (2004). Finite-order weights imply tractability of multivariate integration. *J. Complexity*, 20(1), 46–74.
- Smolyak, S. (1963). Quadrature and interpolation formulas for tensor products of certain classes of functions. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 4, 240–243.
- Stein, E. und Weiss, G. (1971). *Introduction to Fourier Analysis on Euclidean Spaces*. Princeton: Princeton University Press.
- Szabo, A. und Ostlund, N. S. (1989). *Modern Quantum Chemistry*. New York: McGraw-Hill Publishing Company.
- Temlyakov, V. (1989). *Approximation of functions with a bounded mixed derivative. Transl. from the Russian by H. H. McFaden*. Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics, 178. Providence, RI: American Mathematical Society (AMS). vi, 121 p. .
- Thaller, B. (2000). *Visual Quantum Mechanics*. Berlin: Springer.
- Thaller, B. (2004). *Advanced Visual Quantum Mechanics*. Berlin: Springer.
- Triebel, H. (1992). *Theory of function spaces II.*, Band 84 der Reihe *Monographs in Mathematics*. Basel: Birkhäuser Verlag.
- Triebel, H. (2006). *Theory of function spaces. III.*, Band 100 der Reihe *Monographs in Mathematics*. Basel: Birkhäuser.
- van Winter, C. (1964). Theory of finite systems of particles. I: The Green function. *Mat.-Fys. Skr., Danske Vid. Selsk.*, 2(8).
- van Winter, C. (1965). Theory of finite systems of particles. II: Scattering theory. *Mat.-Fys. Skr., Danske Vid. Selsk.*, 2(10).
- von Neumann, J. (1932). *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin: Springer-Verlag.
- Wasilkowski, G. und Woźniakowski, H. (2009). Polynomial-time algorithms for multivariate linear problems with finite-order weights: Average case setting. *Found. Comput. Math.*, 9(1), 105–132.
- Weidmann, J. (2000). *Lineare Operatoren in Hilberträumen, Teil I: Grundlagen*. Stuttgart: Teubner Verlag.
- Weidmann, J. (2003). *Lineare Operatoren in Hilberträumen. Teil II: Anwendungen*. Stuttgart: Teubner Verlag.
- Wilcox, H. und Myers, D. L. (1994). *An introduction to Lebesgue integration and Fourier series*. Mineola: Dover.
- Yserentant, H. (1986). On the multi-level splitting of finite element spaces. *Numer. Math.*, 49, 379–412.

- Yserentant, H. (2003). On the electronic Schrödinger equation. *Lecture Notes, Universität Tübingen*. Erhältlich unter <http://na.uni-tuebingen.de>.
- Yserentant, H. (2004). On the regularity of the electronic Schrödinger equation in Hilbert spaces of mixed derivatives. *Numer. Math.*, 98(4), 731–759.
- Yserentant, H. (2005). Sparse grid spaces for the numerical solution of the electronic Schrödinger equation. *Numerische Mathematik*, 101, 381–389.
- Yserentant, H. (2010a). *Regularity and Approximability of Electronic Wave Functions*, Band 2000 der Reihe *Lecture Notes in Mathematics*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer.
- Yserentant, H. (2010b). *The Mixed Regularity of Electronic Wave Functions Multiplied by Explicit Correlation Factors*. Technical report, DFG-Schwerpunktprogramm 1324, Preprint 49.
- Zenger, C. (1990). Sparse grids. In W. Hachbusch (Hrsg.), *Parallel Algorithms for Partial Differential Equations*, Band 31 der Reihe *Notes on Numerical Fluid Mechanics* (S. 241–251).: Vieweg.
- Zhislin, G. (1960). Untersuchung des Spektrums des Schrödingerschen Operators für Systeme von vielen Teilchen. *Tr. Moskov. Mat. Obshch.*, 9, 81–120.