

Bachelorarbeit zum Thema

Datengetriebene äußere Differentialrechnung auf Graphen zur Diskretisierung elliptischen partiellen Differentialgleichungen

Vorgelegt von:	Morteza Montahae
Matrikelnummer:	3262962
Bearbeitungszeitraum:	24. Mai 2024 – 14. August 2024
Erstgutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Martin Reißel
Zweitgutachter:	Prof. Dr. rer. nat. Gerhard Dikta



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung 4.0 International Lizenz.

Erklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Bachelorarbeit selbständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe.

Alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus Veröffentlichungen entnommen sind, sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit ist noch nicht veröffentlicht und ist in ähnlicher oder gleicher Weise noch nicht als Prüfungsleistung zur Anerkennung oder Bewertung vorgelegt worden.

Aachen, den 26. August 2024

Inhalt

1 Einleitung

1.1	Motivation und Aufgabestellung	2
1.2	Vorgehensweise	3

2 Grundlagen

2.1	Maschinelles Lernen	5
2.1.1	Rahmenwerk für statistisches Lernen	5
2.1.2	Verlustfunktion	8
2.1.3	Gleichmäßige Konvergenz	10
2.1.4	Neuronales Netzwerk	12
2.2	Differentialoperator	15
2.2.1	Differentialoperatoren in der Magnetostatik	24
2.3	Optimierungsproblem	32
2.3.1	Nichtlineare Programmierung	33
2.3.2	Gradientenabstiegsverfahren	34
2.3.3	Das Newton-Verfahren	36
2.3.4	Stochastischer Gradientenabstieg	41
2.4	Partielle Differentialgleichung	43
2.4.1	Klassifikation von PDEs	44
2.5	Homologie	46
2.5.1	Kategorientheorie	50
2.5.2	Topologische Räume	53
2.5.3	Singuläre Homologie	55
2.5.4	Euler-Charakteristik	60
2.6	Kohomologie	64
2.6.1	Mannigfaltigkeiten	66
2.6.2	Der Satz von Stokes	72
2.6.3	Laplace-Operatoren	74
2.7	Laplace-Operatoren auf Graphen	79
2.7.1	Der Algebraische Graph-Laplacian	82
2.7.2	Spektrum normalisierter Laplacian auf Graphen	84

3 Datengetriebene äußere Rechnung

3.1	Datengetriebene Koränder und Koableitungen	92
3.2	Nichtlineare Störung von Hodge-Laplacian	96

3.3	Wohlgestellttheit	97
3.4	Konstruktion von Kettenkomplexe	100
3.5	PDE-abhängige Optimierung	102
3.6	Numerische Ergebnisse	105
4	Anhang	
4.1	Abbildungsverzeichnis	109
4.3	Abkürzungsverzeichnis	110
4.4	Literaturverzeichnis	111

Kurzfassung

In dieser Arbeit wird der Aufstieg Physik-informierter Ansätze in wissenschaftlichen maschinellen Lernaufgaben erörtert, wie z. B. Physik-informierte neuronale Netze (PINNs), die durch die Einführung von Regularisierern, die Abweichungen von physikalischen Eigenschaften bestrafen, Erfolge verzeichnen konnten. Diese physikalischen Eigenschaften werden jedoch nur innerhalb des Optimierungsfehlers durchgesetzt und können nur eine relativ grobe Toleranz aufweisen. Die aktuelle Arbeit schlägt einen struktur-erhaltenden maschinellen Lernansatz vor, der Physik stark durchsetzt, im Gegensatz zu Physik-informiertem maschinellem Lernen, das die Physik nur schwach einbezieht. Dieser Ansatz zielt auf eine separate Klasse von Problemen ab, die für bestehende Physik-informierte Ansätze unzugänglich sind.

Einleitung

In diesem Kapitel

1.1	Motivation und Aufgabestellung	2
1.2	Vorgehensweise	3

wird ein Rahmenwerk vorgestellt, das datengetriebene Netzwerkmodelle erstellt, die die mathematischen Strukturen der grundlegend physikalische Randbedingungen bewahren. Es wird diskutiert, wie diese Modelle in verschiedenen Bereichen, einschließlich des maschinellen Lernens, eingesetzt werden können. Darüber hinaus wird ein neuer Ansatz vorgeschlagen, der die genannten Randbedingungen stärker in den Vordergrund stellt, im Gegensatz zu bisherigen Ansätzen, die Randbedingungen bzw. die Physik nur schwach berücksichtigen können. Dieser Ansatz zielt auf eine separate Klasse von Problemen ab, die für bestehende Physik-informierte Ansätze unzugänglich sind.

1.1 Motivation und Aufgabestellung

Motivation

Mit der zunehmenden Anwendung traditioneller Methoden des maschinellen Lernens (ML) in Wissenschaft und technische Applikationen haben sich Physik-informierte Methoden als effektive Werkzeuge zur Sicherstellung der physikalischen Realisierbarkeit von Schlussfolgerungen erwiesen. Diese Methoden setzen die Einhaltung physikalischer Gesetze meist schwach durch sogenannte Penalty-Methoden durch. Zur starken Durchsetzung wird in dieser Arbeit ein Rahmenwerk für die äußeren Rechnung repräsentiert, die der kombinatorischen Hodge-Theorie und physikkompatiblen Diskretisierung partieller Differentialgleichungen (en. *partial differential equations* (PDEs)) voraussetzt. Historisch gesehen sind diese beiden Bereiche weitgehend voneinander getrennt, da Graphen streng topologische Objekte sind, denen die metrischen Informationen fehlen, die für die PDE-Diskretisierung grundlegend sind.

Aufgabestellung

In folgendem wird ein Ansatz vorgestellt, bei dem diese fehlenden metrischen Informationen aus Daten gelernt werden können. Dies geschieht unter Verwendung von Graphen als grobmaschige Netz-Surrogate, die Struktur aus der kombinatorischen Hodge-Zerlegung erben. Die daraus resultierende Methode, genannt datengetriebener äußerer Rechnung (eng. *data-driven exterior calculus* (DDEC)), kann struktur-erhaltende Ersatzmodelle extrahieren, die mathematische Garantien der Wohlgestelltheit^{*} bieten. Dieser Ansatz ermöglicht Partiellen Differentialgleichungen als Nebenbedingungen einer Optimierungsstrategie (en. *PDE-constrained optimization*) für das Training, wodurch sichergestellt wird, dass maschinell gelernte Modelle die Physik bis zur Maschinenpräzision erzwingen, selbst bei schlecht trainierten Modellen oder kleine Datenmenge.

Außerdem werden vor allem Modelle in Betracht gezogen, die nichtlineare Störungen elliptischer Probleme reproduzieren, sowie Beispiele für das Lernen von $H(\text{div})/H(\text{curl})$ -Systemen, die konkret für die Elektromagnetik repräsentativ (2.1.3.1) sind. Die Lösungen von PDEs beruhen im Allgemeinen auf Berechnungsnetzen, die den Raum in disjunkte krummlinige Zellen bzw. Koordinaten aufteilen. Sowohl Netzwerke als auch Gitternetze haben eine gemeinsame topologische Struktur, die eine einheitliche Analyse im Rahmen der äußeren Rechnung erlaubt. Dieser Ansatz bewahrt die Erhaltungseigenschaften und die spektralen Darstellungen von Operatoren, bietet eine koordinatenfreie Möglichkeit, die Physik auf Mannigfaltigkeiten vorzuschreiben, und auch ermöglicht den Umgang mit den nichttrivialen Nullräumen, die in der Elektromagnetik erforderlich sind.

Die Kernaussage dieser Arbeit ist, dass man die gemeinsame Struktur von Graphen und Gittern

^{*} Ein mathematisches Problem heißt wohlgestellt wenn folgende Bedingungen erfüllt sind [Had02]:

- Das Problem hat eine Lösung (Existenz).
- Diese Lösung ist eindeutig bestimmt (Eindeutigkeit).
- Diese Lösung hängt stetig von den Eingangsdaten ab.

ausnutzen und Daten verwenden kann, um der Rechnung auf Graphen "fehlende" metrische Informationen hinzuzufügen und eine datengetriebene äußere Rechnung (DDEC) zu lernen. Dies garantiert, dass die mathematischen Strukturen, die mit der Erhaltung und den Eigenschaften von exakten Sequenzen zusammenhängen, unabhängig von den Fehlern sind, die beim Training auftreten.

1.2 Vorgehensweise

Die Anwendung von äußeren Rechnungen ist grundlegend für das Erlernen nichtlinearer Störungen von Div-Grad- und Div-Curl-Modellproblemen (2.2.16). Diese sind Beispiele aus der Physik, die die Erhaltung der Struktur erfordern. Die numerische Analyse wird verwendet, um die Bedingungen für eine eindeutige Lösung des erlernten Modells zu bestimmen. Die datengetriebene äußere Rechnung erbt die wünschenswerten Eigenschaften der Rechnung auf Graphen, die zur Analyse der Wohlgestelltheit einer Klasse von nichtlinearen elliptischen Problemen verwendet wird.

Eine zentrale Implementierungsfrage ist, wie man einen Graphen erhält, um das Modell zu definieren. Ein Beispiel dafür ist die grobmaschigkeit eines hochaufgelösten Netzes, das entweder mit einer Finite-Elemente-Method (FEM) oder durch Histogrammbinning experimenteller Daten verbunden ist. Die relevanten kommutativen Diagramme bleiben bei der grobmaschigkeit erhalten. Als nächstes wird ein Optimierer der PDE-Restriktionsprobleme eingeführt, um das Modell an die Daten anzupassen, wobei die Durchsetzung der Physik genau durch eine Gleichungsrestriktion ermöglicht wird. Die numerische Analyse zeigt, dass das mit den Gleichungsrestriktionen verbundene Vorwärtsproblem bei milden Bedingungen für die Modellstruktur immer wohlgestellt ist.

Abschließend werden mehrere numerische Ergebnisse präsentiert, die die Analyse für kanonische elliptische Probleme validieren, die skalare und magnetische Diffusion (2.2.1.16) beinhalten und Kompatibilität erfordern. Dies zeigt, wie man effiziente, physikalisch erhaltende Ersatzmodelle aus hochaufgelösten Daten lernen kann.

Grundlagen

In diesem Kapitel

2.1	Maschinelles Lernen	5
2.2	Differentialoperator	15
2.3	Optimierungsproblem	32
2.4	Partielle Differentialgleichung .	43
2.5	Homologie	46
2.6	Kohomologie	64
2.7	Laplace-Operatoren auf Graphen	79

wird eine Einführung in die grundlegenden Konzepte des maschinellen Lernens (Maschinelles Lernen) und der partiellen Differentialgleichungen (engl. PDE) gegeben. Es werden die Prinzipien des maschinellen Lernens, seine Anwendungsgebiete, das statistische Lernrahmenwerk, die Bedeutung von Trainingsdaten und die empirische Risikominimierung erläutert. Zudem wird der Aufbau und die Funktionsweise traditioneller neuronaler Netzwerke beschrieben.

Im Anschluss werden die Definition und Klassifikation von PDE, die Einführung in Sobolev- und Hilbert-Räume, den Laplace-Operator sowie wichtige mathematische Ungleichungen wie die Friedrichs- und Poincaré-Ungleichung zusammengefasst.

2.1 Maschinelles Lernen

Lernen basiert auf der Nutzung vergangener Erfahrungen, um zukünftiges Verhalten zu verbessern. Ein Beispiel ist die Köderscheu bei Ratten, die lernen, giftige Nahrung zu vermeiden. Dieses Lernen unterscheidet sich von der Bildung des abergläubischen Verhaltens bei Tauben*, die zufällige Aktionen mit Futtervergabe verbinden. Effektives Lernen erfordert die Fähigkeit zur Generalisierung und die Einbeziehung von Vorwissen, um sinnvolle Muster zu erkennen und zufällige Korrelationen zu ignorieren. Diese Prinzipien sind entscheidend für die Entwicklung von maschinellen Lernalgorithmen, die von Erfahrungen lernen und sinnvoll generalisieren können. Maschinelles Lernen wird gebraucht, wenn Aufgaben zu komplex sind, um direkt programmiert zu werden, oder **Anpassungsfähigkeit** erfordern. Maschinelle Lernprogramme können sich an wechselnde Bedingungen anpassen, im Gegensatz zu starren vorprogrammierten Werkzeugen. Diese Anpassungsfähigkeit ist entscheidend in Anwendungen wie Spam-Erkennung, Spracherkennung und Optimierungsaufgaben, bei denen es notwendig ist, optimale Lösungen in komplexen Problemräumen zu finden. Maschinelles Lernen überschneidet sich mit Statistik, Informationstheorie, Spieltheorie und Optimierung, wobei der Schwerpunkt auf datengetriebener Mustererkennung und der Nutzung der Rechenleistung zur Ergänzung menschlicher Intelligenz liegt. Im Gegensatz zur traditionellen Statistik priorisiert maschinelles Lernen algorithmische Effizienz und endliche Stichprobenbeschränkungen, ohne vordefinierte Datenmodelle anzunehmen. Maschinelles Lernen umfasst verschiedene Paradigmen, die auf unterschiedliche Aufgaben zugeschnitten sind, hauptsächlich klassifiziert nach der Art der Überwachung, der Aktivität des Lernenden, der Hilfsbereitschaft des Lehrers und dem Lernprotokoll. Überwachtes Lernen beinhaltet gelabelte Trainingsdaten, während unüberwachtes Lernen mit ungelabelten Daten umgeht und verstärkendes Lernen zusätzliche Informationen vorhersagt. Aktive Lernende interagieren mit ihrer Umgebung, im Gegensatz zu passiven Lernenden, die nur beobachten. Lernender können hilfreich, passiv oder gegenseitig sein und beeinflussen so den Lernprozess. Schließlich erfordert Online-Lernen Echtzeit-Entscheidungen, während Batch-Lernen große Datensätze verarbeitet, bevor Schlussfolgerungen gezogen werden. [SB14a]

2.1.1 Rahmenwerk für statistisches Lernen

Definition 2.1.1.1 In der Grundeinstellung des statistischen Lernens hat der Lernende in Rahmen seiner **Eingabe** Zugang zu folgenden Elementen:

- **Domänensatz:** Eine beliebige Menge \mathcal{X} mit Objekten, die wir möglicherweise beschriften bzw. labeln möchten. I.d.R. werden diese Domänenpunkte durch einen Vektor von Merkmalen repräsentiert. Wir bezeichnen Domänenpunkte auch als **Instanzen** und \mathcal{X} als Instanzraum.

* Siehe 'Superstition' in the Pigeon experiment.

- **Labelsatz:** Für unsere aktuelle Diskussion beschränken wir den Labelsatz auf eine Zweielementmenge, normalerweise $\{0, 1\}$ oder $\{-1, +1\}$. Mit \mathcal{Y} Bezeichnen wir unsere Menge der möglichen Labels.
- **Trainingsdaten:** $S = ((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m))$ ist eine endliche Sequenz von Paaren in $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, dass eine Sequenz von gelabelte Domänenpunkten bedeutet. Diese ist die Eingabe, auf die der Lernende Zugriff hat. Wir bezeichnen S manchmal auch als Trainingsmenge.

Dieser Ansatz entspricht dem **Offline** oder **Batch** Learning, bei dem der Lernende Zugriff auf einen festen und unveränderlichen von Trainingsdatensatz hat, bevor der Lernprozess beginnt.

Definition 2.1.1.2 In Rahmen seiner **Ausgabe** wird der Lernenden aufgefordert, eine Vorhersagerege $h_S : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ auszugeben (wobei der Index S auf die Abhängigkeit der h von S hinweist). Diese Funktion wird auch als **Prädiktor**, **Hypothese** oder **Klassifikator** bezeichnet. Der Prädiktor kann verwendet werden, um das Label neuer Domänenpunkte vorherzusagen.

Definition 2.1.1.3 Trainingsdaten werden generiert, indem Instanzen (2.1.1.1) gemäß einer Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{D} über \mathcal{X} abgetastet und dann mit einer korrekten Labelfunktion $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ gelabelt werden. Das bedeutet, dass jedes Paar (x_i, y_i) in den Trainingsdaten S durch Abtasten von x_i gemäß \mathcal{D} und anschließendes Labeln mit $y_i = f(x_i)$ entsteht. Dies wird zusammen als einaches Daten-**Generierungsmodell** bezeichnet.

Definition 2.1.1.4 Die Fehler eines **Klassifikators** $h : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ wird als die Wahrscheinlichkeit definiert, dass h auf einem zufälligen Datenpunkt \mathcal{X} , der gemäß der Verteilung \mathcal{D} generiert wurde, nicht das korrekte Label $f(x)$ vorhersagt. Formal gegeben für eine Subdomäne $A \subset \mathcal{X}$ ordnet die Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{D} eine Zahl $D(A)$ zu, die bestimmt wie wahrscheinlich es ist, einen Punkt $x \in A$ zu beobachten. Dies wird oft als ein Ereignis bezeichnet, welche mittels einer Funktion $\pi : \mathcal{X} \rightarrow \{0, 1\}$ nämlich $A = \{x \in \mathcal{X} : \pi(x) = 1\}$ repräsentiert wird. Zum Ausdruck $D(A)$ verwenden wir die Notation $\mathbb{P}_{x \sim \mathcal{D}}[\pi(x)]$.

Damit lautet

$$L_{D,f}(h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{P}_{x \sim \mathcal{D}}[h(x) \neq f(x)] \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{D}(\{x : h(x) \neq f(x)\}) \quad (2.1.1)$$

Generalisierungsfehler, Risiko oder wahrer Fehler von h . Dabei bezieht sich der Buchstabe L für den Fehler auf den Verlust (engl. Loss) des Lernenden.

Bemerkung 2.1.1.5 Der Lernende kennt die Grundverteilung \mathcal{D} und Labelfunktion f nicht. Deshalb ist der wahre Fehler für ihn nicht direkt verfügbar. Ein Alternative zum wahren Fehler ist der sogenannte **empirische** Fehler, der wie folgt definiert.

Definition 2.1.1.6 (Trainingsfehler) Ein Trainingsfehler – der Fehler, den der Klassifikator über die **Trainingsstichprobe** verursacht, definiert durch

$$L_S(h) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{|\{i \in [m] : h(x_i) \neq y_i\}|}{m} \quad (2.1.2)$$

, wobei $[m] = \{1, \dots, m\}$. Dieser wird oft als empirischer Fehler oder empirisches Risiko versehen.

Bemerkung 2.1.1.7 Da die Trainingsstichprobe die verfügbare Momentaufnahme der Welt (Daten) für den Lernenden darstellt, macht es Sinn, eine Lösung zu suchen, die auf diesen Daten gut funktioniert. Dieses Lernparadigma – einen Prädiktor h zu entwickeln, der $L_S(h)$ minimiert – wird **Empirische Risikominimierung (ERM)** genannt.

Bemerkung 2.1.1.8 Überanpassung, oder Overfitting (**Abbildung 2.1**) kann beim ERM auftreten, wenn der Algorithmus zu sehr stark darauf optimiert, den Fehler auf den Trainingsdaten zu minimieren. Dies kann dazu führen, dass das Modell nicht nur die entsprechenden Muster in den Daten erlernt, sondern auch die zufälligen Schwankungen und das Rauschen in den Trainingsdaten.

Definition 2.1.1.9 (Hypothesenklasse) Im Fall eines eingeschränkten Suchraums wählt der Lernende im Voraus eine Menge von Prädiktoren aus, die als **Hypothesenklasse** \mathcal{H} bezeichnet wird. Der ERM-Lernalgorithmus sucht dann den Prädiktor $h \in \mathcal{H}$ mit dem geringsten Fehler über die Trainingsdaten S aus. Formal gesehen

$$ERM_{\mathcal{H}}(S) \in \underset{h \in \mathcal{H}}{\operatorname{argmin}} L_S(h).$$

Diese Einschränkungen führt zu einer Verzerrung in Richtung dieser Prädiktoren und wird als **induktive Verzerrung** bezeichnet.

Bemerkung 2.1.1.10 Unter der Realisierbarkeitsannahme wird die Annahme der Existenz einer $h^* \in \mathcal{H}$ mit $L_{(D,f)}(h^*) = 0$ betont. Diese Annahme impliziert, dass mit Wahrscheinlichkeit 1 über zufällige Stichproben S , bei denen die Instanzen von S gemäß \mathcal{D} und durch f gelabelt sind und damit $L_S(h^*) = 0$, was wiederum $L_S(h_S) = 0$ für $h_S \in \underset{h \in \mathcal{H}}{\operatorname{argmin}} L_S(h)$ bedeutet.

Bemerkung 2.1.1.11 Die Beispieldaten (engl. Examples) im Trainingsdatensatz sind in Zusammenhang mit der Verteilung \mathcal{D} unabhängig und identisch verteilt (engl. independently and identically distributed (*i.i.d.*)). Das heißt, jedes x_i in S wird anhand von \mathcal{D} abgetastet und dann entsprechend der Labelsfunktion f gelabelt.

Definition 2.1.1.12 (PAC-Erlernbarkeit) Eine Hypothesenklasse \mathcal{H} ist **PAC** (Probably Approximately Correct)-**lernbar**, wenn es eine Funktion $m_{\mathcal{H}} : (0, 1)^2 \rightarrow \mathbb{N}$ und einen Lernalgorithmus gibt, der die folgende Eigenschaft besitzt: Gilt die Realisierbarkeitsannahme bezüglich \mathcal{H} , \mathcal{D} und f für jedes $\epsilon, \delta \in (0, 1)$, für jede Verteilung \mathcal{D} über \mathcal{X} und für jede Labelsfunktion $f : \mathcal{X} \rightarrow \{0, 1\}$, liefert dann

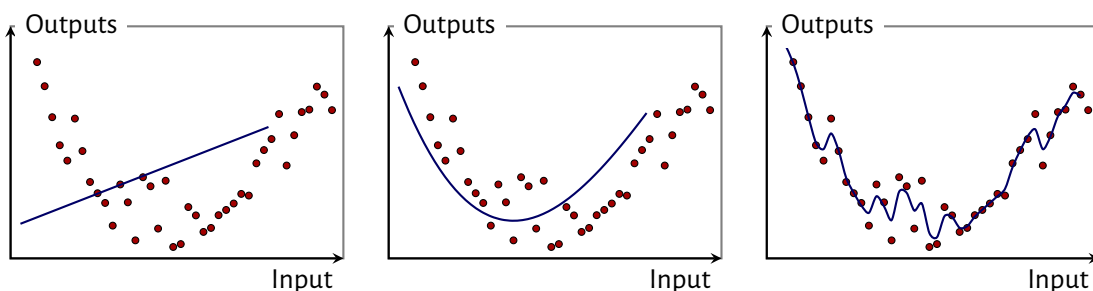


Abbildung 2.1: Von links Unteranpassung, gute Anpassung und Überanpassung bei einem Datenmodell

der Lernalgorithmus bei $m \geq m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta)$ i.i.d. Beispieldaten, die durch \mathcal{D} generiert und durch f gelabelt sind, eine Hypothese h zurück, so dass mit einer Wahrscheinlichkeit von mindestens $1 - \delta$ (über die Auswahl der Beispieldaten) $L_{(\mathcal{D}, f)}(h) \leq \epsilon$.

Korollar 2.1.1.13 Jede finite Hypothesenklasse ist PAC-lernbar mit der Stichprobenkomplexität [SB14b]

$$m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta) \leq \left\lceil \frac{\log\left(\frac{|\mathcal{H}|}{\delta}\right)}{\epsilon} \right\rceil.$$

2.1.2 Verlustfunktion

Bemerkung 2.1.2.1 Wir erweitern ab jetzt \mathcal{D} zu einer Wahrscheinlichkeitsverteilung über $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$, wobei, wie zuvor, \mathcal{X} unser Domänensatz ist und \mathcal{Y} eine Labelsatz (Menge von Labels) darstellt (meistens wird $\mathcal{Y} = \{0, 1\}$ oder $\{-1, +1\}$). Anders gesagt, ist \mathcal{D} eine Multivariate Verteilung über Domänenpunkte und Labels. Man kann eine solche Verteilung als zusammengesetzt aus zwei Teilen betrachten: eine Verteilung \mathcal{D}_x über ungelabelte Domänenpunkte (manchmal als Randverteilung bezeichnet) und eine bedingte Wahrscheinlichkeit über Labels für jeden Domänenpunkt, $D((x, y)|x)$.

Definition 2.1.2.2 In einer Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{D} über $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ ist die Wahrscheinlichkeit eines Fehlers beim zufälligen Ziehen gelabter Punkte messbar. Folglich kann der wahre Fehler (oder das Risiko) einer Vorhersageregeln h erneut definiert werden:

$$L_D(h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{P}_{(x,y) \sim \mathcal{D}} [h(x) \neq f(x)] \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{D}(\{(x, y) : h(x) \neq y\}) \quad (2.1.3)$$

Bemerkung 2.1.2.3 Der Lernende kennt die generierenden Daten für \mathcal{D} nicht und hat Zugang zu den Trainingsdaten S . Daher bleibt die Definition des empirischen Risikos dieselbe wie zuvor (2.1.2).

Definition 2.1.2.4 (Agnostische PAC-Erlernbarkeit) Eine Hypothesenklasse \mathcal{H} ist *agnostisch* PAC-lernbar, wenn es eine Funktion $m_{\mathcal{H}} : (0, 1)^2 \rightarrow \mathbb{N}$ und einen Lernalgorithmus gibt, der die folgende Eigenschaft erfüllt: Gilt die Realisierbarkeitsannahme bezüglich \mathcal{H} , \mathcal{D} und f für jedes $\epsilon, \delta \in (0, 1)$, für jede Verteilung \mathcal{D} über \mathcal{X} und für jede Labelsfunktion $f : \mathcal{X} \rightarrow \{0, 1\}$, liefert dann der Lernalgorithmus bei $m \geq m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta)$ i.i.d. Beispieldaten (2.1.1.11), die durch \mathcal{D} generiert und durch f gelabelt sind, eine Hypothese h zurück, so dass mit einer Wahrscheinlichkeit von mindestens $1 - \delta$ (über die Auswahl der Beispieldaten),

$$L_{\mathcal{D}}(h) \leq \min_{h' \in \mathcal{H}} L_{\mathcal{D}}(h') + \epsilon.$$

Bemerkung 2.1.2.5 Bei der Erweiterung des Konzepts in der maschinellen Lerntheorie kann ein Lernalgorithmus so gestaltet werden, dass er mehr als zwei Klassen unterscheiden. Im Gegensatz

zur binären Klassifikation, bei der nur zwei Klassen unterschieden werden, kann die Multiklassen-Klassifikation eine beliebige Anzahl von Klassen behandeln.

Definition 2.1.2.6 (Regression) Regression ist ein Konzept in der maschinellen Lerntheorie, bei dem man versucht, einfache Muster in den Daten zu finden, eine funktionale Beziehung zwischen den \mathcal{X} - und \mathcal{Y} -Komponenten der Daten.

Bemerkung 2.1.2.7 Wir können die Qualität einer Hypothesenfunktion, $h : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$, anhand des erwarteten quadratischen Unterschieds zwischen den wahren Labels und ihren vorhergesagten Werten bewerten, nämlich:

$$L_D(h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}_{(x,y) \sim \mathcal{D}} [h(x) - y]^2. \quad (2.1.4)$$

Bemerkung 2.1.2.8 (Generalisierte Verlustfunktionen) Gegeben sei eine Menge \mathcal{H} (die die Rolle unserer Hypothesen oder Modelle spielt) und eine Domäne Z . Sei $\ell : \mathcal{H} \times Z \rightarrow \mathbb{R}_+$. Dabei bezieht sich $Z = \mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ auf Vorhersageprobleme. Damit ist der Begriff der Verlustfunktion jedoch über Vorhersageaufgaben hinaus verallgemeinert und erlaubt daher, dass Z jede Domäne von Beispieldaten sein kann (zum Beispiel in unüberwachten Lernaufgaben ist Z kein Produkt aus einer Instanzdomäne und einer Labeldomäne).

Definition 2.1.2.9 (Risikofunktion) Gegeben sei $h \in \mathcal{H}$. In Bezug auf eine Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{D} die Risikofunktion über Z wie folgt

$$L_{\mathcal{D}}(h) \stackrel{\text{def}}{=} \mathbb{E}_{z \sim \mathcal{D}} [\ell(h, z)]. \quad (2.1.5)$$

Bemerkung 2.1.2.10 In der Gleichung (2.1.5) wird die Erwartung des Verlusts von h über zufälliges Objekt z in der entsprechenden \mathcal{D} betrachtet. Ähnlich kann das empirische Risiko als den erwarteten Verlust über eine gegebene Stichprobe $S = (z_1, z_2, \dots, z_m) \in Z_m$ definiert werden.

$$L_S(h) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \ell(h, z_i). \quad (2.1.6)$$

Bemerkung 2.1.2.11 (Klassische Verlustfunktionen) Gemäß den bisher gesprochenen Klassifikationen und Regression, kann folgende Verlustfunktionen spezifisch vorgestellt werden:

- **0 – 1 Verlust:** Hier fasst die Zufallsvariable z über die Menge der Paare $\mathcal{X} \times \mathcal{Y}$ um und die Verlustfunktion ist

$$\ell_{0-1}(h, (x, y)) = \begin{cases} 1 & \text{falls } h(x) \neq y \\ 0 & \text{falls } h(x) = y \end{cases}$$

Diese Verlustfunktion wird in binären oder multiklassen Klassifikationsproblemen verwendet. Dabei ist es zu beachten, dass für eine Zufallsvariable, α , die die Werte $\{0, 1\}$ annehmen kann, $\mathbb{E}_{\alpha \sim \mathcal{D}}[\alpha] = \mathbb{P}_{\alpha \sim \mathcal{D}}[\alpha = 1]$

- **Quadratischer Verlust**[†]: Analog zur Zufallsvariable z im vorherigen Fall ist Verlustfunktion definiert durch

$$\ell_{\text{sq}}(h, (x, y)) = (h(x) - y)^2.$$

- **RMSE** Ein gängiges Gütemaß für Regressionsaufgaben, das empirisch auf dem quadratischen Verlust (2.1.4) basiert, ist die Wurzel des mittleren quadrierten Fehlers (engl. **root mean squared error (RMSE)**)

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - h(x_i))^2}. \quad (2.1.7)$$

Definition 2.1.2.12 (Agnostische PAC-Lernbarkeit für allgemeine Verlustfunktionen) Eine Hypothesenklasse \mathcal{H} ist agnostisch PAC-lernbar (2.1.2.4) in Bezug auf eine Menge Z und eine Verlustfunktion $\ell : \mathcal{H} \times Z \rightarrow \mathbb{R}_+$, wenn es eine Funktion $m_{\mathcal{H}} : (0, 1)^2 \rightarrow \mathbb{N}$ und einen Lernalgorithmus mit folgender Eigenschaft gibt: Wird der Lernalgorithmus für jedes $\epsilon, \delta \in (0, 1)$ und für jede Verteilung \mathcal{D} über Z auf $m \geq m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta)$ i.i.d. Beispieldaten (2.1.1.11) ausgeführt, die von \mathcal{D} generiert werden, liefert der Algorithmus $h \in \mathcal{H}$ zurück, so dass mit einer Wahrscheinlichkeit von mindestens $1 - \delta$ (über die Auswahl der m Trainingsbeispiele),

$$L_{\mathcal{D}}(h) \leq \min_{h' \in \mathcal{H}} L_{\mathcal{D}}(h') + \epsilon,$$

wobei $L_{\mathcal{D}}(h) = \mathbb{E}_{z \sim \mathcal{D}} [\ell(h, z)]$. [SB14c]

2.1.3 Gleichmäßige Konvergenz

Wenn die Eigenschaft der gleichmäßigen Konvergenz für eine Hypothesenklasse \mathcal{H} zutrifft, dann werden die **empirischen** Risiken der Hypothesen in \mathcal{H} in den meisten Fällen ihre wahren Risiken widerspiegeln. Gleichmäßige Konvergenz ist die Voraussetzung für agnostische PAC-Lernbarkeit (2.1.2.4) unter Verwendung der ERM-Regel.

Definition 2.1.3.1 (ϵ -repräsentativ) In Bezug auf die Domäne Z , die Hypothesenklasse \mathcal{H} , die Verlustfunktion ℓ und die Verteilung \mathcal{D} wird ein Trainingsdatensatz S als $[\epsilon]$ -repräsentativ bezeichnet, falls

$$\forall h \in \mathcal{H}, |L_S(h) - L_{\mathcal{D}}(h)| \leq \epsilon.$$

Lemma 2.1.3.2 Sei ein Trainingsdatensatz S $\frac{\epsilon}{2}$ -repräsentativ. Dann erfüllt jede Ausgabe von $\text{ERM}_{\mathcal{H}(S)}$, nämlich jedes $h_S \in \arg \min_{h \in \mathcal{H}} L_S(h)$ die Bedingung

$$L_{\mathcal{D}}(h_S) \leq \min_{h \in \mathcal{H}} L_{\mathcal{D}}(h) + \epsilon.$$

[†] Oft wird es auch **Gauß**-Verlust genannt.

Beweis. Für jedes $h \in \mathcal{H}$ gilt

$$L_{\mathcal{D}}(h_S) \leq L_S(h_S) + \frac{\epsilon}{2} \leq L_S(h) + \frac{\epsilon}{2} \leq L_{\mathcal{D}}(h) + \frac{\epsilon}{2} + \frac{\epsilon}{2} = L_{\mathcal{D}}(h) + \epsilon,$$

wobei die erste und dritte Ungleichung auf der Annahme beruhen, dass S $\frac{\epsilon}{2}$ -repräsentativ ist (2.1.3.1), und die zweite Ungleichung auch gilt, weil h_S ein ERM-Prädiktor ist. \square

Definition 2.1.3.3 Eine Hypothesenklasse \mathcal{H} besitzt die Eigenschaft der gleichmäßigen Konvergenz, falls es eine Funktion $m_{\mathcal{H}}^{UC} : (0, 1)^2 \rightarrow \mathbb{N}$ existiert, sodass für alle $\epsilon, \delta \in (0, 1)$ und für jede Wahrscheinlichkeitsverteilung \mathcal{D} über einer Domäne Z folgendes gilt:

Wenn S eine Stichprobe von Beispieldaten $m \geq m_{\mathcal{H}}^{UC}(\epsilon, \delta)$ ist, die i.i.d. bzgl. \mathcal{D} gezogen werden (2.1.1.11), dann ist S mit einer Wahrscheinlichkeit von mindestens $(1 - \delta)$, ϵ -repräsentativ.

Korollar 2.1.3.4 Besitzt eine Klasse \mathcal{H} mit einer Funktion $m_{\mathcal{H}}^{UC}$ die Eigenschaft der gleichmäßigen Konvergenz, ist die Klasse dann agnostisch PAC-lernbar mit der Stichprobenkomplexität $m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta) \leq m_{\mathcal{H}}^{UC}(\frac{\epsilon}{2}, \delta)$. Ferner ist das $\text{ERM}_{\mathcal{H}}$ -Paradigma in diesem Fall ein erfolgreicher agnostischer PAC-Lernende für \mathcal{H} .

Korollar 2.1.3.5 Sei \mathcal{H} eine endliche Hypothesenklasse, Z eine Domäne, und $\ell : H \times Z \rightarrow [0, 1]$ eine Verlustfunktion. Dann besitzt \mathcal{H} die Eigenschaft der uniformen Konvergenz mit der Stichprobenkomplexität

$$m_{\mathcal{H}}^{UC}(\epsilon, \delta) \leq \left\lceil \frac{\log\left(\frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}\right)}{2\epsilon^2} \right\rceil.$$

Darüber hinaus ist die Klasse agnostisch PAC-lernbar unter Verwendung des *ERM* Algorithmus mit der Stichprobenkomplexität

$$m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta) \leq m_{\mathcal{H}}^{UC}\left(\frac{\epsilon}{2}, \delta\right) \leq \left\lceil \frac{2 \log\left(\frac{2|\mathcal{H}|}{\delta}\right)}{\epsilon^2} \right\rceil.$$

Bemerkung 2.1.3.6 (Diskretisierungstrick) Obwohl das vorangehende Korollar nur für finite Hypothesenklassen gilt, gibt es einen einfachen Trick, der es ermöglicht, die praktische Stichprobenkomplexität unendlicher Hypothesenklassen gut abzuschätzen. Dabei werden die Hypothesenklasse durch eine Reihe von Parametern definiert. Zum Beispiel sei $\mathcal{X} = \mathbb{R}$, $\mathcal{Y} = \pm 1$, und die Hypothesenklasse \mathcal{H} seine alle Funktionen der Form $h_{\theta}(x) = \text{sign}(x - \theta)$. Damit wird jede Hypothese durch einen Parameter $\theta \in \mathbb{R}$ mit 1 für Instanzen größer als θ und -1 für kleiner als θ parametrisiert.

In der Praxis wird eine 64-Bit-Gleitkommadarstellung verwendet, was bedeutet, dass die tatsächliche Größe der Hypothesenklasse auf höchstens 2^{64d} beschränkt ist, wobei d die Anzahl der Parameter ist. Die Stichprobenkomplexität solcher Klassen ist durch $m_{\mathcal{H}}(\epsilon, \delta) \leq \frac{128d \log(2/\delta)}{\epsilon^2}$ beschränkt. Es ist jedoch wichtig zu beachten, dass diese obere Schranke von der spezifischen Darstellung der reellen Zahlen abhängt, die von der Maschine verwendet wird. [SB14d]

Definition 2.1.3.7 Sei \mathcal{H} eine Klasse von Funktionen von einem Domänensatz \mathcal{X} nach $\{0, 1\}$. Ferner sei $C = \{c_1, \dots, c_m\} \subset \mathcal{X}$. Die Restriktion von \mathcal{H} auf C ist die Menge von Funktionen von C nach

$\{0, 1\}$, die aus \mathcal{H} abgeleitet werden können. Das heißt,

$$\mathcal{H}_C = \{(h(c_1), \dots, h(c_m)) : h \in \mathcal{H}\},$$

wobei wir jede Funktion von C nach $\{0, 1\}$ als Vektor in $\{0, 1\}^{|C|}$ darstellen.

Definition 2.1.3.8 (Shattering) Eine Hypothesenklasse \mathcal{H} **zerbricht** (engl. shatters) eine finite Menge $C \subset \mathcal{X}$, wenn die Restriktion von \mathcal{H} auf C die Menge aller Funktionen von C nach $\{0, 1\}$ ist. Das heißt, $|\mathcal{H}_C| = 2^{|C|}$.

Definition 2.1.3.9 Die **VC-Dimension** einer Hypothesenklasse \mathcal{H} , bezeichnet als $\text{VCdim}(\mathcal{H})$, ist die maximale Größe einer Menge $C \subset \mathcal{X}$, die von \mathcal{H} zerbrochen werden kann. Wenn \mathcal{H} Mengen beliebig großer Größe zerbrechen kann, sagen wir, dass \mathcal{H} eine unendliche VC-Dimension hat.

Korollar 2.1.3.10 Sei \mathcal{H} eine Klasse unendlicher VC-Dimension. Dann ist \mathcal{H} **nicht** PAC-lernbar[SB14e].

2.1.4 Neuronales Netzwerk

Als ein Rechenmodell dient ein **künstliches** neuronales Netzwerk, das von der Struktur neuronaler Netzwerke im Gehirn inspiriert ist, um komplexe, nichtlineare Probleme zu lösen. Es besteht aus einer großen Anzahl grundlegender Recheneinheiten (Neuronen), die in einem komplexen Kommunikationsnetzwerk verbunden sind, was hochkomplexe Berechnungen ermöglicht.

Definition 2.1.4.1 Ein neuronales Netzwerk ist ein **gerichteter** Graph (**Abbildung 2.2**), bei dem die Knoten Neuronen und die Kanten Verbindungen zwischen ihnen entsprechen. Jedes Neuron empfängt als Eingabe eine gewichtete Summe der Ausgaben der Neuronen, die mit seinen eingehenden Kanten verbunden sind. Wir konzentrieren uns in diesem Abschnitt auf Feedforward-Netzwerke, bei denen der entsprechenden Graph keine Zyklen enthält.

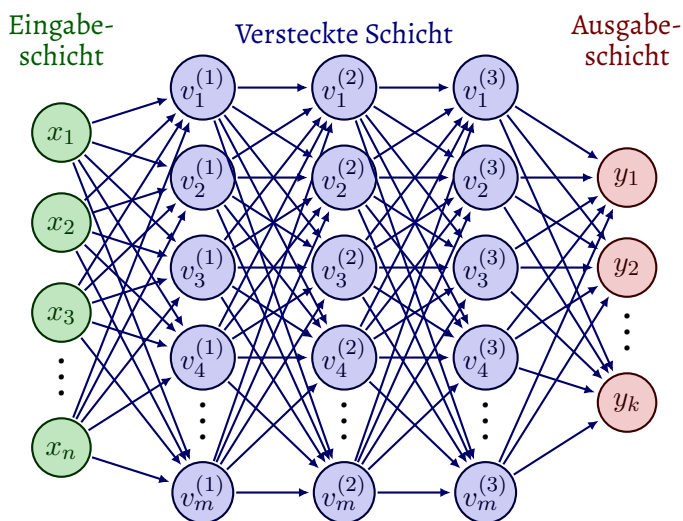


Abbildung 2.2: Eine **traditionelle** Sicht auf neuronales Netzwerk.

Definition 2.1.4.2 Im Kontext des Lernens besteht eine Hypothesenklasse (2.1.1.9) aus neuronalen Netzwerkprädiktoren, bei denen alle Hypothesen (2.1.1.2) die entsprechende Graphstruktur des Netzwerks teilen und sich in den Gewichten über den Kanten unterscheiden.

Satz 2.1.4.3 Jeder Prädiktor über n Variablen, der in der Zeit $T(n)$ implementiert werden kann, kann auch als neuronaler Netzwerkprädiktor der Größe $O(T(n)^2)$ ausgedrückt werden, wobei die Größe des Netzwerks die Anzahl der Knoten darstellt.

Bemerkung 2.1.4.4 Die Familie der Hypothesenklassen neuronaler Netzwerke polynomialer Größe kann für alle praktischen Lernaufgaben ausreichen, bei denen unser Ziel darin besteht, Prädiktoren zu lernen, die effizient implementiert werden können. Die Stichprobenkomplexität des Lernens solcher Hypothesenklassen ist ebenfalls in Bezug auf die Größe des Netzwerks beschränkt.

Definition 2.1.4.5 Ein **Feedforward**-Neuronales Netzwerk wird durch einen gerichteten azyklischen Graphen beschrieben, $G = (V, E)$, und eine Gewichtungsfunktion über den Kanten, $w : E \rightarrow \mathbb{R}$. Knoten des Graphen entsprechen Neuronen. Jedes einzelne Neuron wird als einfache skalare Funktion modelliert, $\sigma : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. Wir konzentrieren uns auf drei mögliche Funktionen für σ : die Signum-Funktion, $\sigma(a) = \text{sign}(a)$, die **Schwellenwert**-Funktion, $\sigma(a) = 1[a > 0]$, **ReLU**-Funktion $\sigma(a) = \max(0, x)$, **Tanh**-Funktion $\sigma(a) = \tanh(a)$, und die **Sigmoid**-Funktion, $\sigma(a) = \frac{1}{1 + \exp(-a)}$, welche eine glatte Annäherung an die Schwellenwert-Funktion darstellt. Wir nennen allgemein σ die **Aktivierungsfunktion** des Neurons.

Bemerkung 2.1.4.6 Eine Aktivierungsfunktion ist ein allgemeinerer Begriff und bezieht sich auf jede Funktion, die auf den gewichteten Eingang eines Neurons angewendet wird, um die Ausgabe zu bestimmen. Im klassischen **Perzeptron**, also das Algorithmus zum Lernen eines binären Klassifikators, wird oft die Schwellenwert-Funktion als Aktivierungsfunktion verwendet. In modernen neuronalen Netzwerken werden jedoch häufig andere Aktivierungsfunktionen wie **ReLU**(Rectified Linear Unit), **Sigmoid** oder **Tanh**(Hyperbolic Tangent) verwendet, um nichtlineare Beziehungen besser modellieren zu können.

Definition 2.1.4.7 Ein **geschichtetes** Feedforward-Neuronales Netzwerk ist in Schichten organisiert, wobei die Menge der Knoten in eine Vereinigung von (nichtleeren) disjunkten Teilmengen zerlegt werden kann, $V = \bigcup_{t=0}^T V_t$, sodass jede Kante in E einen Knoten in V_{t-1} mit einem Knoten in V_t verbindet, für ein $t \in [T]$. Die unterste Schicht, V_0 , ist die **Eingabeschicht**. Sie enthält $n + 1$ Neuronen, wobei n die Dimensionalität des Eingaberaums ist. Die Schichten V_1, \dots, V_{T-1} werden oft als **versteckte** Schichten bezeichnet. Die oberste Schicht, V_T , ist die **Ausgabeschicht**. Bei einfachen Vorhersageproblemen enthält die Ausgabeschicht ein einziges Neuron, dessen Ausgabe die Ausgabe des Netzwerks ist. Dabei sind als Teil des neuronalen Netzwerkstruktur

- **Breite:** Dies bezieht sich auf die Anzahl der Neuronen in einer einzelnen Schicht des Netzwerks. Ein breites Netzwerk hat viele Neuronen pro Schicht.
- **Tiefe:** Es bezieht sich auf die Anzahl der versteckten Schichten. Ein Netzwerk mit vielen versteckten Schichten wird als tiefes neuronales Netzwerk bezeichnet.

- **Lernrate**: Als weiterer Parameter bestimmt die Lernrate die Schrittweite, mit der die Gewichte des neuronalen Netzwerks während des Trainings angepasst werden.

Bemerkung 2.1.4.8 Ist ein neuronales Netzwerk durch (V, E, σ, w) spezifiziert, erhält man eine Funktion

$$h_{V,E,\sigma,w} : \mathbb{R}^{|V_0|-1} \rightarrow \mathbb{R}^{|V_T|}.$$

Eine Hypothesenklasse neuronaler Netzwerkprädiktoren wird damit für beim Graph (V, E) und der Aktivierungsfunktion σ festgelegt werden. Die Hypothesenklasse umfasst alle Funktionen der Form $h_{V,E,\sigma,w}$ für ein $w : E \rightarrow \mathbb{R}$. Das Tripel (V, E, σ) wird oft als die Architektur des Netzwerks bezeichnet (**Abbildung 2.3**). Die Hypothesenklasse als

$$H_{V,E,\sigma} = \{h_{V,E,\sigma,w} \mid w : E \mapsto \mathbb{R}\}$$

bezeichnet. Dabei wird eine Hypothese in der Hypothesenklasse durch die **Gewichte** über den Kanten des Netzwerks parametrisiert.

Bemerkung 2.1.4.9 Bei der Untersuchung der Approximationsfehler von $H_{V,E,\sigma}$ wird vor allem die Hypothesenfunktionen entsprechender Graphgröße betrachtet. Der Abschätzungsfehler von $H_{V,E,\sigma}$ für den Fall der binären Klassifikation (d.h., $|V_T| = 1$ und σ ist die Signum-Funktion), kann durch Untersuchung der VC-Dimension (2.1.3.9) analysiert werden [SB14f].

Definition 2.1.4.10 (Hyperparameter) Sie sind Parameter, die die Struktur und das Verhalten eines neuronalen Netzwerks bestimmen und vor dem Training festgelegt werden. Beispiele für Hyperparameter sind **Tiefe**, **Breite**, die **Lernrate** (2.1.4.7), die Art der **Aktivierungsfunktion** (2.1.4.5) und die Batch-Größe (2.1.1.1). Diese Parameter werden nicht während des Trainings gelernt, sondern müssen vorab festgelegt werden.

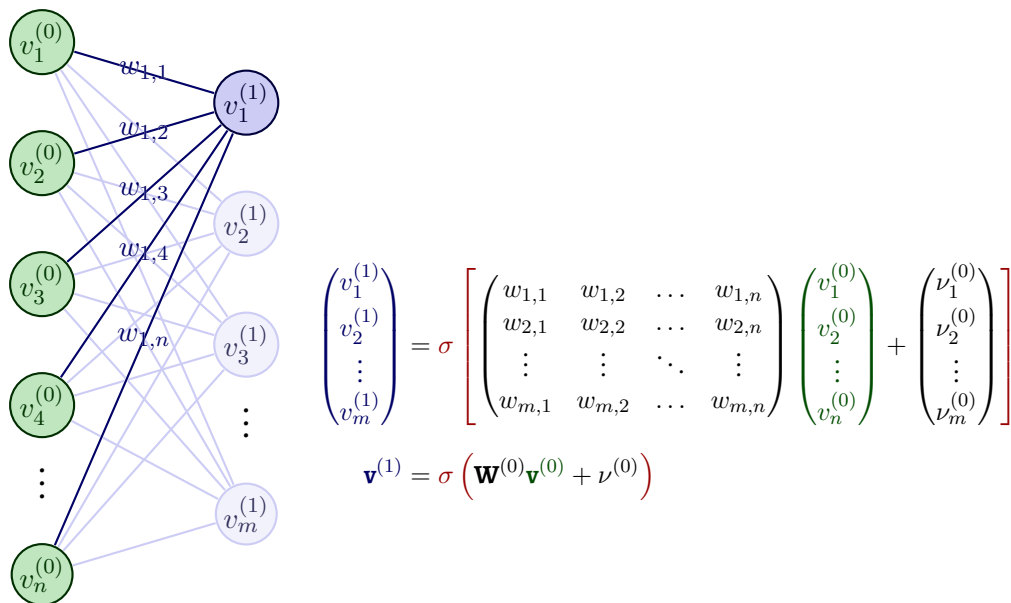


Abbildung 2.3: Die **Architektur** eines neuronalen Netzwerks.

2.2 Differentialoperator

Ein **Differentialoperator** ist eine mathematische Konstruktion, die eine Funktion als Eingabe aufnimmt und eine andere, typischerweise unter Einbeziehung von Ableitung der Eingabefunktion, zurückliefert. Im einfachsten Fall kann ein Differentialoperator die Operation der Differentiation darstellen. Differentialoperatoren sind ein wichtiges Werkzeug in vielen Bereichen der Mathematik, darunter Differentialgleichung bzw. Differentialrechnung und ermöglichen uns, komplexe mathematische Beziehungen in einer kompakten und oft besser handhabbaren Form auszudrücken.

Definition 2.2.1 Eine Teilmenge $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ heißt

- **Gebiet**, wenn Ω offen und zusammenhängend (engl. Connected) ist, d.h. um jeden Punkt $x \in \Omega$ gibt es einen offenen **Ball** $B_\epsilon(x) \subseteq \Omega$ und je zwei Punkte $x_1, x_2 \in \Omega$ können durch eine stetige Kurve Γ verbunden werden, die ganz in Ω verläuft (siehe auch 2.5.2.2).
- **konvex**, wenn es ein Gebiet ist und je zwei Punkte $x_1, x_2 \in \Omega$ durch eine Strecke $\Sigma = \{x_1 + t(x_2 - x_1) \mid 0 \leq t \leq 1\}$ verbunden werden können, die ganz in Ω liegt.
- **kompakt**, wenn sie **abgeschlossen** und **beschränkt** (2.5.2.2) ist.

Definition 2.2.2 Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$

- **Abschließung** (engl. Closure) der Menge Ω in \mathbb{R}^n , bezeichnet als $\overline{\Omega}$, ist die Menge

$$\overline{\Omega} = \{\Omega \subseteq \mathbb{R}^n \mid \Omega \subseteq A \text{ und } A \text{ ist abgeschlossen in } \mathbb{R}^n\}.$$

- **Innere** (engl. Interior) der Menge Ω , bezeichnet als $\text{Int}(\Omega)$, ist die Menge

$$\text{Int}(\Omega) = \bigcup \{B \subseteq \mathbb{R}^n \mid B \subseteq \Omega \text{ und } B \text{ ist offen in } \mathbb{R}^n\}.$$

- **Äußere** (engl. Exterior) Ω , bezeichnet $\text{Ext}(\Omega)$ ist definiert durch

$$\text{Ext}(\Omega) = \mathbb{R}^n \setminus \overline{\Omega}.$$

- **Randpunkt** von Ω ist ein Punkt $x \in \mathbb{R}^n$, falls für jedes $\epsilon > 0$

$$B_\epsilon(x) \cap \Omega \neq \emptyset \text{ und } B_\epsilon(x) \cap (\mathbb{R}^n \setminus \Omega) \neq \emptyset.$$

- **Rand** der Menge Ω , bezeichnet $\partial\Omega$, ist die Menge aller Randpunkte der Ω . D.h.

$$\partial\Omega = \mathbb{R}^n \setminus \left(\text{Int}(\Omega) \cup \text{Ext}(\Omega) \right).$$

Definition 2.2.3 Sei $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion auf einer offenen Menge $U \subseteq \mathbb{R}^n$. Die skalare Funktion f heißt nach i -Variablen **partiell differenzierbar**, wenn für $x \in U$ das Limit

$$D_i f(x) \equiv \frac{\partial f}{\partial x_i}(x) := \lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_{i-1}, x_i + t, x_{i+1}, \dots, x_n) - f(x)}{t}, \quad (2.2.1)$$

existiert.

Definition 2.2.4 (Vektoroperator) Ein **Vektoroperator** ist ein Differentialoperator, der in der Vektorrechnung verwendet wird. Er operiert auf **Skalar-** oder **Vektorfeldern** und erzeugt als Ergebnis ein Skalar- oder ein Vektorfeld. Die Anwendungen von Vektoroperatoren sind vielfältig und umfassen Bereiche wie die Strömungsdynamik, den Elektromagnetismus und die Quantenmechanik, wo sie zur Beschreibung verschiedener physikalischer Phänomene verwendet werden.

Bemerkung 2.2.5 In Zusammenhang von **PDEs** (siehe Abschnitt 2.4) bezieht sich der Vektoroperator meistens auf die Operationen, die an Vektorfeldern durchgeführt werden, wie z.B. **Gradient**, **Divergenz** und **Rotation** (engl. Curl). Diese Operatoren werden verwendet, um Eigenschaften wie die Änderungsrate oder den **Fluss** (Abbildung 2.4) eines Feldes an einer bestimmten Stelle zu berechnen.

Präliminarien 2.2.6 (Norm und Produkt)

- **Kronecker-Delta:** Seien $i, j \in I$, wobei I eine beliebige Indexmenge ist. Das **Kronecker-Delta** ist definiert wie folgt:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{falls } i \neq j \\ 1 & \text{falls } i = j. \end{cases} \quad (2.2.2)$$

- **Prä-Hilbertraum:** Man zeichnet ein \mathbb{K} -Vektorraum H als **Prä-Hilbertraum** (PHR), wenn für alle $x, y \in H$ ein Skalarprodukt $\langle x, y \rangle \in K$ wie folgt definiert ist:

$$(S1) \quad \begin{cases} \langle y, x \rangle = \langle x, y \rangle & \text{falls } \mathbb{K} = \mathbb{R} \\ \langle y, x \rangle = \overline{\langle x, y \rangle} & \text{falls } \mathbb{K} = \mathbb{C} \end{cases} \quad (2.2.3)$$

$$(S2) \quad \langle x, \lambda y + \mu z \rangle = \lambda \langle x, y \rangle + \mu \langle x, z \rangle \quad (2.2.4)$$

$$(S3) \quad \langle x, x \rangle \geq 0 \text{ und } \langle x, x \rangle = 0 \Leftrightarrow x = 0 \quad (2.2.5)$$

Ist $\dim H < \infty$ und $\mathbb{K} = \mathbb{R}$, so heißt H auch **euklidischer** Raum, im Falle $\mathbb{K} = \mathbb{C}$ wird ein **unitärer** Raum genannt.

- **Schwarz-Ungleichung:** Für jede $x, y \in H$, PHR , gilt die Schwarz'sche Ungleichung, nämlich

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq \langle x, x \rangle \langle y, y \rangle \quad \forall x, y \in H, \quad (2.2.6)$$

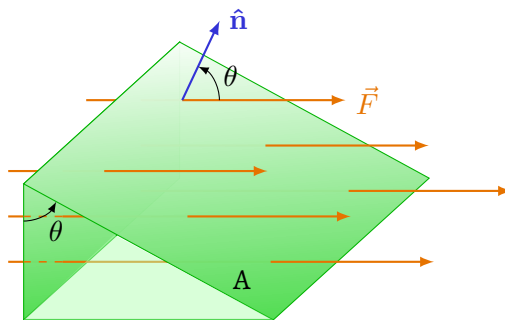


Abbildung 2.4: der skalare Fluss $\Phi = \mathbf{F} \cdot \mathbf{A} \cdot \cos(\theta) = \int \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dA$

und die Gleichheit tritt genau dann ein, falls X und y linear abhängig sind.

► **Vektornorm:** Jeder $PHR H$ ist ein **normierter linearer Raum** (NLR) mit der Norm

$$\|x\| := \sqrt{\langle x, x \rangle}, \quad x \in H \quad (2.2.7)$$

Das heißt, die Abbildung $H \rightarrow \mathbb{R} : x \mapsto \|x\|$ erfüllt die folgenden Eigenschaften:

$$(N1) \quad \|x\| \geq 0 \text{ und } \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$$

$$(N2) \quad \|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$$

$$(N3) \quad \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\| \text{ (Dreiecksungleichung).}$$

► **Leray-Schauder-Randbedingung:** Sei \mathbb{X} ein normierter Raum. Die **stetige** Abbildung $f : \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$ erfüllt die Leray-Schauder-Randbedingung, falls ein Radius $r > 0$ mit $\|x\| = r$ mit

$$f(x) \neq \lambda x \quad \forall \lambda > 1, \quad (2.2.8)$$

existiert.

► **Orthonormalität:**

a. Zwei Elemente $x, y \in H$ heißen **orthogonal**, wenn $\langle x, y \rangle = 0$. In diesem Fall schreibt man $x \perp y$.

b. Eine Menge $\{x_1, \dots, x_n, \dots\} \subseteq H$ wird als **Orthogonalsystem** (OGS) bezeichnet, wenn jede zwei Elemente

$$\langle x_i, x_j \rangle = 0 \quad \text{für } i \neq j$$

und als **Orthonormalsystem** (ONS), wenn

$$\langle x_i, x_j \rangle = \delta_{ij}. \quad (\text{Kronecker}) \quad (2.2.9)$$

c. Eine Basis \mathcal{B} von H , die ein (ONS) ist, wird **Orthonormalbasis** (ONB) genannt.

d. Ein $OGS \{x_1, \dots, x_n\} \subseteq H$ mit $x_j \neq 0$ für $j = 1, \dots, n$ ist eine **linear unabhängige** Menge. Insbesondere ist jedes ONS linear unabhängig.

e. Ist $\{x_1, \dots, x_n, \dots\} \subseteq H$ linear unabhängig, so existiert ein ONS mit $\{e_1, \dots, e_n, \dots\} \subseteq H$ mit

$$LH(x_1, \dots, x_n) = LH(e_1, \dots, e_n) \quad \text{für alle } n^\dagger.$$

► **Eindeutigkeit:** Sei $\mathcal{B} = (e_1, \dots, e_n)$ ONB von H .

[†] Das L steht für das Lineare Gleichungssystem und sein Kombination mit X wird LX auf die Lösung des System verweisen.

a. Jedes $x \in H$ hat die eindeutige Darstellung

$$x = \sum_{k=1}^n \langle e_k, x \rangle e_k \quad (2.2.10)$$

mit den **Fourierkoeffizienten** $\xi_k = \langle e_k, x \rangle$ als Koordinaten.

b. Für alle $x, y \in H$ gilt

$$\langle x, y \rangle = \sum_{k=1}^n \langle e_k, x \rangle \langle e_k, y \rangle \quad (2.2.11)$$

Insbesondere wir haben

$$\|x\|^2 = \sum_{k=1}^n |\langle e_k, x \rangle|^2. \quad (2.2.12)$$

► **Direkte Zerlegung:** Sei V ein \mathbb{K} -Vektorraum, U und W lineare Unterräume von V . V wird als **direkte Summe** von U und W , nämlich

$$V = U \oplus W, \quad (2.2.13)$$

falls sich jeder $v \in V$ eindeutig in der Form $v = u + w$ mit $u \in U$ und $w \in W$ beschreiben werden kann. Dabei sind u und w die **Komponente** von v in U bzw. in W . Diese Beziehung nennt man eine **direkte Zerlegung**.

► **Orthogonales Komplement:**

a. Für eine Teilmenge $M \subseteq H$ ist das **orthogonale Komplement** von M

$$M^\perp \stackrel{\text{def}}{=} \{x \in H \mid \langle m, x \rangle = 0 \text{ für alle } m \in M\} \quad (2.2.14)$$

ein linearer Unterraum von H .

b. Ist H endlichdimensional (d.h. $\dim H < \infty$) und $U \subseteq H$ ein linearer Unterraum, so gilt

$$H = U \oplus U^\perp \quad \text{und} \quad U^{\perp\perp} = U. \quad (2.2.15)$$

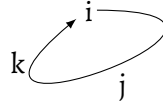
► **Vektorprodukt:** Gegeben sei die Standardbasis $\{E_1, E_2, E_3\}$ des \mathbb{R}^3 , bestehend aus den Einheitsvektoren E_1, E_2 und E_3 . Für zwei Vektoren

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^3,$$

definiert man das Vektorprodukt (**Kreuzprodukt**) $A \times B$ im \mathbb{R}^3 durch

$$A \times B := \begin{vmatrix} E_1 & E_2 & E_3 \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 b_3 - a_3 b_2 \\ a_3 b_1 - a_1 b_3 \\ a_1 b_2 - a_2 b_1 \end{pmatrix}. \quad (2.2.16)$$

- **ε -Tensor:** wir betrachten die Quaternionsymbolen i, j, k als Einheitsvektoren. Ihr Vektorprodukt kann wie folgt dargestellt werden.



Dieser kann durch einen **ε -Tensor**[§], nämlich

$$\varepsilon_{ijk} \equiv \text{sign}(ijk) = \begin{cases} +1 & \text{für Permutation } (123), (312), (231), \\ -1 & \text{für Permutation } (213), (321), (132), \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

wiedergespiegelt werden. Damit kann die Rechnung des Vektorprodukts zwischen zwei Vektoren unter folgende Beobachtungen vereinfacht werden:

- a. Es gilt

$$\sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} . \quad (2.2.17)$$

- b. Für Vektoren $A, B \in \mathbb{R}^3$ gelten

$$(A \times B)_k = \sum_{i=1}^3 \varepsilon_{ijk} a_i b_j . \quad (2.2.18)$$

- c. Für Vektoren $A, B, C, D \in \mathbb{R}^3$ gelten die folgenden Identitäten:

– Das vektorielle Dreifachprodukt:

$$A \times (B \times C) = B(A \cdot C) - C(A \cdot B), \quad (2.2.19)$$

– Das Skalarprodukt zweier Kreuzprodukte:

$$(A \times B) \cdot (C \times D) = (A \cdot C)(B \cdot D) - (A \cdot D)(B \cdot C), \quad (2.2.20)$$

– Und insbesondere die Norm des Kreuzproduktes:

$$\|A \times B\|^2 = \|A\|^2 \|B\|^2 - (A \cdot B)^2. \quad (2.2.21)$$

Diese Gleichungen sind fundamental in der Vektoranalysis und spielen eine wichtige Rolle in der Beschreibung räumlicher Beziehungen und Eigenschaften von Vektoren im dreidimensionalen Raum [GH07a].

Definition 2.2.7 (Vektorfunktion) Sei Ω ein Gebiet (2.2.1) und $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eine skalare Funktion, und

[§] Oft wird es auch das **Levi-Civita-Symbol** genannt.

$F = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_m \end{pmatrix} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^m$ eine Vektorfunktion. Die Vektorfunktion F heißt partiell differenzierbar in $x \in \Omega$ nach der i ten Variablen, wenn alle partiellen Ableitungen $D_1 f_1(x), \dots, D_i f_m(x)$ (2.2.1) existieren. Somit setzt man:

$$D_i F(x) = \begin{pmatrix} D_i f_1(x) \\ \vdots \\ D_i f_m(x) \end{pmatrix}, \quad (2.2.22)$$

d.h. Vektorfunktionen werden immer **komponentenweise** differenziert.

Definition 2.2.8 (Gradient) Sei $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion auf einer offenen Menge $U \subseteq \mathbb{R}^n$. Existiert es für alle x_i s die partielle Ableitungen $D_1 f(x), \dots, D_n f(x)$ (2.2.1), repräsentiert der Vektor

$$\text{grad } f(x) \equiv \nabla f(x) := \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right)^T \quad (2.2.23)$$

den **Gradient** der Funktion f .

Bemerkung 2.2.9 Die **Jacobi**-Matrix der **skalaren** Funktion f , nämlich $Jf(x)$, ist als Zeilenvektor die Transponierte ihres Gradienten.

$$Jf(x) = (\nabla f(x))^T = \left(\frac{\partial f}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial f}{\partial x_n} \right) \quad (2.2.24)$$

Falls die Vektorfunktion F partiell differenzierbar im Gebiet Ω , so heißt

$$JF(x) = \begin{pmatrix} D_1 f_1(x) & \cdots & D_n f_1(x) \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ D_1 f_m(x) & \cdots & D_n f_m(x) \end{pmatrix} \quad (2.2.25)$$

die **Jacobi**-Matrix der **Vektorfunktion** F im Ω , wobei $D_i f_j(x) = \frac{\partial f_j(x)}{\partial x_i}$.

Definition 2.2.10 An der Stelle $x \in U$ ist die **Richtungsableitung** der f entlang die Richtung $d \in \mathbb{R}^n$ gegeben durch

$$f'(x; d) := \lim_{t \searrow 0} \frac{f(x + td) - f(x)}{t},$$

vorausgesetzt, der Grenzwert auf der rechten Seite existiert, wenn $t \geq 0$ gegen Null geht.

Eine Richtungsableitung hat folgende Eigenschaften:

- **Linearität in der Richtung:** $f'(x; \alpha d) = \alpha f'(x; d) \quad \forall \alpha \geq 0$
- **Antisymmetrie:** Wenn die Richtungsableitung in Richtung $-d$ existiert, dann ist sie das negative der Richtungsableitung in Richtung d d.h. $f'(x; -d) = -f'(x; d)$

Falls die Richtungsableitung $f'(x; d)$ für alle Richtungen $d \in \mathbb{R}^n$ als eine lineare Funktion von d existiert, heißt denn die Funktion $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ **Gâteaux** differenzierbar.

Definition 2.2.11 Die Funktion $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ heißt an der Stelle $x \in U \subset \mathbb{R}^n$ **Fréchet** differenzierbar, falls eine lineare Funktion $\ell : U \rightarrow \mathbb{R}$, $\ell(x) = \langle l, x \rangle$ existiert, sodass

$$\lim_{\|h\| \rightarrow 0} \frac{f(x+h) - f(x) - \langle l, h \rangle}{\|h\|} = 0. \quad (2.2.26)$$

Bemerkung 2.2.12 Intuitiv bedeutet **Fréchet** Differenzierbarkeit, dass die Funktion f in der Umgebung eines Punktes x gut durch eine affine Funktion $h \mapsto f(x) + \langle l, h \rangle$ (siehe auch 2.5.3.8) angenähert werden kann. Das heißt:

$$f(x+h) \approx f(x) + \langle l, h \rangle.$$

Hierbei stellt $\langle l, h \rangle$ das Skalarprodukt dar, das die Änderung von f in Richtung des Vektors h beschreibt. Diese Approximation kann mit der Landau'schen kleinen-O-Notation präzisiert werden. Ein Vektor $o(h) \in \mathbb{R}^n$ erfüllt:

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\|o(h)\|}{\|h\|} = 0.$$

Das bedeutet, dass $o(h)$ viel kleiner als h wird, wenn h gegen Null geht. Damit ist **Fréchet** Differenzierbarkeit der Funktion f an der Stelle x äquivalent zu

$$f(x+h) = f(x) + \langle l, h \rangle + o(h) \quad (2.2.27)$$

Damit wird die Stetigkeit der Funktion an x versichert, da $\lim_{h \rightarrow 0} f(x+h) = f(x)$.

Bemerkung 2.2.13 Der Vektor l in der Definition der Fréchet-Differenzierbarkeit (2.2.26) kann explizit berechnet werden. Dazu wählen wir $h = te_i$ (wobei e_i die Einheitsvektoren sind) in der Definition der Fréchet-Differenzierbarkeit:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{f(x+te_i) - f(x) - tl_i}{t} = 0.$$

Hieraus folgt, dass $l_i = \frac{\partial f(x)}{\partial x_i}$. Damit ergibt sich der Vektor l als der Gradient von f an der Stelle x :

$$l = \nabla f(x),$$

und daher wird (2.2.27)

$$f(x+h) = f(x) + \langle \nabla f(x), h \rangle + o(h).$$

Satz 2.2.14 Sei $U \subseteq \mathbb{R}^n$ eine offene Menge ist und $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ an der Stelle x **Fréchet**-differenzierbar, dann ist f an dieser Stelle auch **Gâteaux**-differenzierbar [Gül10a].

Bemerkung 2.2.15 Basierend auf physikalischen Interpretationen werden reellwertige Funktionen $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ als **Skalarfelder** und \mathbb{R}^n -wertige Funktionen $\Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ als **Vektorfelder** bezeichnet, wenn Ω eine offene Teilmenge von \mathbb{R}^n ist.

Definition 2.2.16 Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ ein Gebiet und $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^n$ ein C^1 -Vektorfeld.

- **konservativ:** Das Vektorfeld F heißt **konservativ**, falls es ein C^1 -Skalarfeld $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ (skalares **Potenzial**) wie folgt existiert:

$$F = \text{grad } \varphi = \nabla \varphi, \text{ d.h. } f_i = \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (2.2.28)$$

Die φ wird auch oft die Stammfunktion von F genannt.

- **Divergenz:** Für das Vektorfeld F definiert man die **Divergenz** durch

$$\text{div } F \equiv \nabla \cdot F := \sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial x_i} : \Omega \rightarrow \mathbb{R} . \quad (2.2.29)$$

Dabei wird F als **quellenfrei** bezeichnet, wenn $\text{div } F = 0$ im Ω .

- **Divergenzsatz:** Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine kompakte Menge (2.2.1) mit schnittsweise glattem (unendlich differenzierbarem) Rand $S = \partial\Omega$ durch ein äußeres Normaleinheitsvektor (2.6.2.11) \vec{n} . Ferner sei das Vektorfeld $\vec{F} \in C^1(U)$ mit $\Omega \subseteq U$. Dann gilt

$$\int_{\Omega} \text{div } \vec{F} \, d^{(n)} = \oint_{\partial\Omega} \vec{F} \cdot \vec{n} \, d^{(n-1)} S, \quad (2.2.30)$$

wobei $\vec{F} \cdot \vec{n}$ das Standardskalarprodukt (2.2.6) der beiden Vektoren bezeichnet.

- **Laplace-Operator:** Für Skalarfelder $f \in C^2(\Omega)$ wird der **Laplace-Operator** definiert als

$$\Delta f := \text{div } \nabla f = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2 f}{\partial x_k^2} . \quad (2.2.31)$$

F heißt **harmonisch**, wenn $\Delta f = 0$ im Ω .

- **Rotation:** Für $n = 3$ wird die **Rotation** (engl. **Curl**) durch

$$\begin{aligned} \text{rot } F \equiv \nabla \times F &:= \begin{vmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ D_1 & D_2 & D_3 \\ f_1 & f_2 & f_3 \end{vmatrix} \\ &= (D_2 f_3 - D_3 f_2) e_1 + (D_3 f_1 - D_1 f_3) e_2 + (D_1 f_2 - D_2 f_1) e_3, \end{aligned} \quad (2.2.32)$$

d.h.

$$(\text{rot } F)_k := \sum_{i,j=1}^3 (\widehat{\varepsilon_{ijk}}^{(\varepsilon\text{-Tensor})} D_i f_j) \quad (2.2.33)$$

Ist $\text{rot } F = 0$ in Ω , so heißt F **wirbelfrei**.

- **Wirbelfeld:**

a. Ein Vektorfeld $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ wird als **Wirbelfeld** bezeichnet, wenn ein sogenanntes

Vektor**potenzial** $G : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ existiert, sodass gilt:

$$F = \operatorname{rot} G \quad \text{in } \Omega .$$

b. Ist $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ ein Gebiet und $G : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ein C^2 -Vektorfeld, $\varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein C^2 -Skalarfeld, so gilt:

$$\operatorname{rot} \operatorname{grad} \varphi = 0 \quad \text{in } \Omega , \quad (2.2.34)$$

$$\operatorname{div} \operatorname{rot} G = 0 \quad \text{in } \Omega . \quad (2.2.35)$$

c. Das Vektorfeld F ist **wirbelfrei**, falls das $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ **konservativ** (2.2.28) ist. Mit anderen Worten gelten es Integrabilitätsbedingungen

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_k} = \frac{\partial f_k}{\partial x_i} \quad \text{in } \Omega, \quad i, k = 1, 2, 3 . \quad (2.2.36)$$

d. Wenn das Vektorfeld $F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ein **Wirbelfeld** ist, dann ist F **quellenfrei**. Zusätzlich ist für jede C^2 -Funktion $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ die Funktion

$$H(x) := G(x) + \operatorname{grad} \psi(x) = G(x) + \nabla \psi(x)$$

ebenfalls ein Vektor**potenzial** für F .

Satz 2.2.17 Sei $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ ein Gebiet, $\psi, \varphi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ C^2 -Skalarfelder, $F, G : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ C^2 -Vektorfelder. Dann gelten die folgenden Identitäten:

a. $\operatorname{grad}(\varphi\psi) = \varphi \operatorname{grad} \psi + \psi \operatorname{grad} \varphi$

$$\nabla(\varphi\psi) = \varphi \nabla \psi + \psi \nabla \varphi.$$

b. $\operatorname{grad}(F \cdot G) = (JG) \cdot F + (JF) \cdot G + F \times \operatorname{rot} G + G \times \operatorname{rot} F$

$$\nabla(F \cdot G) = (JG) \cdot F + (JF) \cdot G + F \times \operatorname{rot} G + G \times \operatorname{rot} F.$$

c. $\operatorname{div}(\varphi F) = \varphi \operatorname{div} F + (\nabla \varphi) \cdot F$

$$\nabla \cdot (\varphi F) = \varphi \nabla \cdot F + (\nabla \varphi) \cdot F.$$

d. $\operatorname{rot}(\varphi F) = \varphi \operatorname{rot} F + (\operatorname{grad} \varphi) \times F$

$$\nabla \times (\varphi F) = \varphi \nabla \times F + (\nabla \varphi) \times F.$$

e. $\operatorname{div}(F \times G) = -F \cdot \operatorname{rot} G + G \cdot \operatorname{rot} F$

$$\nabla \cdot (F \times G) = -F \cdot \operatorname{rot} G + G \cdot \operatorname{rot} F.$$

$$f. \quad \operatorname{rot}(\operatorname{rot} F) = \operatorname{grad}(\operatorname{div} F) - \operatorname{div}(\operatorname{grad} F)$$

$$\nabla \times (\nabla \times F) = \nabla(\nabla \cdot F) - \nabla \cdot (\nabla F).$$

Beweis.

a. Das folgt direkt aus der Produktregel für partielle Ableitungen.

b. Für die k -te Komponente gilt:

$$(\nabla F \cdot G)_k = D_k \left(\sum_i f_i g_i \right) = \sum_i (D_k f_i) \cdot g_i + \sum_i f_i (D_k g_i).$$

Für $k = 1$ ergibt sich beispielsweise:

$$\begin{aligned} D_1 f_1 \cdot g_1 + D_1 f_2 \cdot g_2 + D_1 f_3 \cdot g_3 &= (D_1 f_1, D_2 f_1, D_3 f_1) \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ g_3 \end{pmatrix} \\ &+ (\operatorname{rot} F)_3 \cdot g_2 - (\operatorname{rot} F)_2 \cdot g_3 = ((JF)G)_1 + (G \times \operatorname{rot} F)_1. \end{aligned}$$

c.

$$\nabla \cdot (\varphi F) = \sum_i D_i(\varphi f_i) = \varphi \sum_i D_i f_i + \sum_i (D_i \varphi) f_i = \varphi \nabla \cdot F + (\nabla \varphi) \cdot F.$$

d.

$$\begin{aligned} (\nabla \times (\varphi F))_k &= \sum_{i,j} \varepsilon_{ijk} D_i(\varphi f_j) = \sum_{i,j} \varepsilon_{ijk} (D_i \varphi) f_j \\ &+ \varphi \sum_{i,j} \varepsilon_{ijk} D_i f_j = (\nabla \varphi \times F)_k + \varphi (\nabla \times F)_k. \end{aligned}$$

Die Beweise für die übrigen Identitäten nach der Umformulierung ergeben sich direkt aus den angegebenen Vektor- und Skalarfeldern sowie den Eigenschaften der Differentialoperatoren [GH07b]. \square

2.2.1 Differentialoperatoren in der Magnetostatik

In der Magnetostatik, einem Teilgebiet der Elektrodynamik, werden Differentialoperatoren verwendet, um die mathematische Beschreibung magnetischer Felder und ihre Wechselwirkungen mit elektrischen Strömen zu formulieren.

Präliminarien 2.2.1.1

- **Strom:** experimentell gesehen, gibt es zwei Arten von elektrischer Ladung q , die als positiv und negativ bezeichnet werden. Ein Strom I existiert, wenn es temporär einen Nettofluss (2.2.1.3)

von Ladung über eine beliebige Ebene im Raum gibt:

$$I = \frac{dq}{dt}$$

Fließt der Strom durch einen Leiter mit der Länge L und dem Querschnittsbereich A , so kann der Strom als

$$I = \rho \frac{L}{L/v} A = \rho v A,$$

geschrieben werden, wobei ρ die Ladungsdichte und v die Geschwindigkeit der Ladungsträger ist.

- **Stromdichte:** Die Stromdichte \vec{J} in einer bestimmten Richtung \vec{n} ist ein Vektor, der durch

$$\vec{J} = \frac{I}{A} \hat{n} = \rho \vec{v} \quad (2.2.37)$$

gegeben ist, wobei \hat{n} der Einheitsvektor senkrecht zu A ist.

- **Ladungserhaltung:** Die Erhaltung der Ladung erfordert, dass jede Änderung der Ladungsdichte innerhalb eines Volumens $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ durch einen Stromfluss durch die Oberfläche $S = \partial\Omega$ kompensiert wird:

$$-\int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \vec{J} \cdot \hat{n} dS \stackrel{\text{Divergenzsatz}}{=} \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{J} d\Omega. \Rightarrow \int_{\Omega} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} d\Omega = 0.$$

Da Ω beliebig ist, führt die letzte Gleichung zur

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0. \quad (2.2.38)$$

- **Ein divergentes und rotationsfreies Feld:** In der Magnetostatik gilt $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, ergibt sich mit (2.2.38)

$$\nabla \cdot \vec{J} = 0. \quad (2.2.39)$$

Dies bedeutet, dass Die Stromdichte \vec{J} ein divergentes und rotationsfreies Feld ist.

- **Rotation der Stromdichte:** Laut dem Helmholtz-Zerlegung Satz Jedes Vektorfeld wie die Stromdichte kann in eine quellenfreie und eine wirbelfreie (2.2.32) Komponente zerlegt werden. Da \vec{J} quellenfrei (2.2.34) ist, können wir schreiben:

$$\vec{J} = \nabla \times \mathbf{u},$$

wobei \mathbf{u} ein Vektorpotential (2.2.16) ist. Aus der Rotation von $\nabla \cdot \vec{J}$ folgt nun

$$\nabla \times \vec{J} = \nabla \times (\nabla \times \mathbf{u})$$

Nach der Vektoridentität (2.2.17)^f gilt:

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = \nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \nabla^2 \mathbf{u}$$

Da $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ (im Coulomb-Eichmaß), vereinfacht sich dies zu:

$$\nabla \times \vec{J} = -\nabla^2 \mathbf{u} \quad (2.2.40)$$

Definition 2.2.1.2 (Magnetische Kraft) Die Kraft auf einen Stromkreis b aufgrund des magnetischen Feld \vec{B}_a , das durch ein anderes Stromkreises a wird beschrieben durch:

$$\vec{F}_{ab} = I_b \oint d\vec{l}_b \times \vec{B}_a.$$

Hierbei ist $d\vec{l}_b$ ein infinitesimales Längenelement entlang des Stromkreises b . Damit ist die Kraft auf eine Ladung q , die sich mit der Geschwindigkeit v bewegt:

$$\vec{F} = \int \frac{dq}{dt} d\vec{l} \times \vec{B} = q\vec{v} \times \vec{B}$$

Bemerkung 2.2.1.3 (Biot-Savart-Gesetz)

- Das Magnetfeld \vec{B} kann aufgrund eines Stroms I (**Abbildung 2.5**) durch das Biot-Savart-Gesetz wie folgt beschrieben werden.

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} I \oint \frac{d\vec{l} \times \vec{R}}{R^3},$$

wobei $\mu_0 \approx 4\pi \times 10^{-7} \frac{N}{A^2}$, eine konstante fundamentale physikalische Größe ist und der Vektor \vec{R} von der Quelle des Stromelements zum Beobachtungspunkt deutet, an dem das magnetische Feld (oder magnetische Flussdichte) bestimmt wird.

- Für eine Oberflächenstromverteilung kann der Gesamtstrom im Biot-Savart-Gesetz verallge-

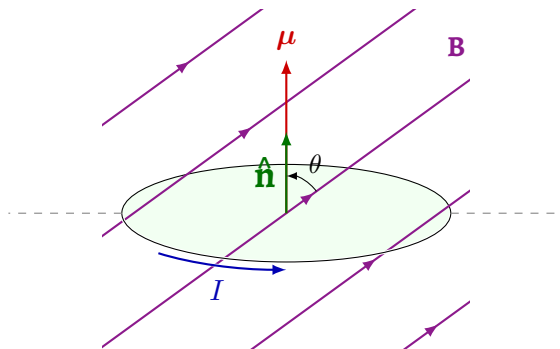


Abbildung 2.5: Ein magnetisches Feld \vec{B} erzeugt durch einen elektrischen Strom I .

meinert werden.

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\partial\Omega} \frac{\vec{K} \times \vec{R}}{R^3} dS, \quad (2.2.41)$$

wobei \vec{K} die Oberflächenstromdichte ist.

- Ähnlich zur Oberfläche wird das Gesetz für die Volumenverteilung nachstehend formuliert werden

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_{\Omega} \frac{\vec{J} \times \vec{R}}{R^3} d\Omega. \quad (2.2.42)$$

- Es ist wichtig zu beachten, dass das Biot-Savart-Gesetz wie viele der anderen mathematischen Gesetze in der Magnetostatik letztlich von der Gültigkeit der experimentellen Ergebnisse zu magnetischen Kräften abhängen.

Definition 2.2.1.4 (Divergenz des Magnetfeldes) Die Divergenz des Magnetfeldes \vec{B} wird durch das Biot-Savart-Gesetz (2.2.42) auf folgende Weise

$$\nabla \cdot \vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\nabla \cdot (\vec{J}' \times \vec{R})}{R^3} d\Omega' \quad (2.2.43)$$

dargestellt, wobei Vorzeichen nur verwendet worden, um die Verwendung von Quellkoordinaten anzuzeigen. Aus der Vektoridentität (2.2.17)^e folgt:

$$\nabla \cdot \vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left(\int \frac{\vec{R} \cdot (\nabla \times \vec{J}')}{R^3} d\Omega' - \int \frac{\vec{J}' \cdot (\nabla \times \vec{R})}{R^3} d\Omega' \right).$$

Die Bestimmungsgröße des Zählers vom ersten Integral (2.2.31)

$$\nabla \times \vec{R} := \begin{vmatrix} e_1 & e_2 & e_3 \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ x - x' & y - y' & z - z' \end{vmatrix} = 0$$

und $\nabla \times \vec{J}' = 0$. wir stellen daher fest, die Divergenz des Magnetfelds verschwindet.

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (2.2.44)$$

Bemerkung 2.2.1.5 (Gaußsches Gesetz) Mit Hilfe des Divergenzsatzes (2.2.30) ergibt sich aus (2.2.44) wie folgt das Gaußsche Gesetz

$$\int_{\partial\Omega} \vec{B} \cdot \hat{n} dS = \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{B} d\Omega = 0 \quad (2.2.45)$$

Dabei ist zu beachten, dass bei der Einführung der $\mathbf{h}(x) := \vec{B} \cdot \hat{n}$ angegeben wird, wie **stark** das magnetische Feld \vec{B} in Richtung des Normalvektors \hat{n} auf der Oberfläche $\partial\Omega$ zeigt und dabei lokalen Wert dieses Flusses für jeden Punkt x auf der Randfläche $\partial\Omega$ als Randbedingung beschrieben wird. Mit anderen Worten dient die Funktion $\mathbf{h}(x)$ als Randbedingung und stellt sicher, dass die gesamte

physikalische Situation, wie durch das Problem vorgegeben, korrekt beschrieben wird.

Präliminarien 2.2.1.6 (Zirkulation des magnetischen Feldes) Wir betrachten Biot-Savart-Gesetz (2.2.42)

$$\mathbb{I} = \int \frac{\vec{J}' \times \vec{R}}{R^3} d\Omega' = \int \nabla \left(\frac{1}{R} \right) \times \vec{J}' d\Omega' \stackrel{(\text{Satz 2.2.17}^e)}{\equiv} \int \left(\nabla \times \frac{\vec{J}'}{R} \right) d\Omega' - \int \frac{1}{R} \nabla \times \vec{J}' d\Omega'.$$

Da im zweiten Integral $\nabla \times \vec{J}' = 0$, vereinfacht sich die letzte Gleichung in der

$$\mathbb{I} = \nabla \times \int \frac{\vec{J}'}{R} d\Omega',$$

und damit ist eine alternative das Magnetfeld (2.2.43) definiert durch

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \nabla \times \int \frac{\vec{J}'}{R} d\Omega'$$

Wenn wir nun die Rotation auf beiden Seiten dieser Gleichung anwenden, erhalten wir

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \nabla \times \nabla \times \int \frac{\vec{J}'}{R} d\Omega' \stackrel{(\text{Satz 2.2.17}^f)}{\equiv} \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\nabla \left(\nabla \cdot \int \frac{\vec{J}'}{R} d\Omega' \right) - \nabla^2 \int \frac{\vec{J}'}{R} d\Omega' \right].$$

Da ∇ nicht auf \vec{J}' angewandt, haben wir

$$\nabla \times \vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\nabla \int \vec{J}' \cdot \nabla \left(\frac{1}{R} \right) d\Omega' - \int \vec{J}' \nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right) d\Omega' \right]. \quad (2.2.46)$$

Ist im zweiten Integral in der letzten Gleichung $R \neq 0$, gilt es dann im Kugelkoordinatensystem

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right) = \frac{1}{r^2} \partial_r \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{R} \right) \right).$$

Da $R = |\vec{r} - \vec{r}_0|$, stellen wir fest, dass $\nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right) = 0$. Obwohl im Fall $R = 0$ $\nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right)$ undefiniert ist, ist das Integral dieses Ausdrucks dennoch durch die Durchführung einer/s kleinen Kugel/Balles um $R = 0$ und unter Anwendung des Divergenzsatzes (2.2.30) wie folgt definierbar

$$\int_{\mathbb{B}_r} \nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right) d\Omega = \int_{\mathbb{B}_r} \nabla \cdot \nabla \left(\frac{1}{R} \right) d\Omega = \int_{\partial \mathbb{B}_r} \nabla \left(\frac{1}{R} \right) \cdot d\vec{S}.$$

Bewertet man das letzte Integral aus der letzten Gleichung auf der Oberfläche der kleinen Kugel, ergibt sich, dass

$$\int \nabla \left(\frac{1}{R} \right) \cdot d\vec{S} = -\frac{1}{R^2} 4\pi R^2 = -4\pi.$$

Mit Hilfe der Dirac-Delta Funktion nämlich,

$$\delta(R) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } \vec{r} = \vec{r}', \\ 0 & \text{wenn } \vec{r} \neq \vec{r}' \end{cases},$$

kann der Integrand aus der letzten Integralrechnung wie unten angegeben werden

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{R} \right) = -4\pi\delta(R) \quad (2.2.47)$$

Nun kann das erste Integral in der Gleichung (2.2.46) mit der Vektoridentität (2.2.17^c) ausgeführt werden, um die Integralgleichung

$$\int \vec{J}' \cdot \nabla \left(\frac{1}{R} \right) d\Omega' = \int \nabla \cdot \left(\frac{\vec{J}'}{R} \right) d\Omega' - \int \frac{1}{R} \nabla \cdot \vec{J}' d\Omega'$$

zu erhalten. Der erste Term auf der rechten Seite kann unter Anwendung des Divergenzsatzes (2.2.30) in ein Oberflächenintegral umgewandelt werden. Dieses verschwindet, falls die Oberfläche, die das Volumen in den Integralen umschließt, ausreichend groß ist. Das zweite Integral verschwindet ebenfalls, da für die Magnetostatik $\nabla \cdot \vec{J}' = 0$. Somit bleibt uns nur das zweite Integral in Gleichung (2.2.46), das aufgrund der Delta-Funktion aus Gleichung (2.2.47) ergibt

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J}. \quad (2.2.48)$$

Bemerkung 2.2.1.7 Durch die Gleichung (2.2.48) wird gezeigt, dass ein stationärer Strom \vec{J} ein Magnetfeld \vec{B} erzeugt, das zirkulär um den Strom verläuft. Dies ist ein grundlegendes Ergebnis der Elektrodynamik und erklärt das Entstehen von Magnetfeldern durch elektrische Ströme, wie es im **Ampèreschen** Gesetz beschrieben wird.

Definition 2.2.1.8 (Ampère-Gesetz) Das Ampère-Gesetz wird durch Integration der Gleichung (2.2.48) über eine Oberfläche S beschrieben:

$$\int (\nabla \times \vec{B}) \cdot d\vec{S} = \mu_0 \int \vec{J} \cdot d\vec{S}.$$

Auf der rechten Seite ergibt die über die Oberfläche integrierte Stromdichte \vec{J} den Gesamtstrom I . Auf der linken Seite kann das Satz von Stokes (2.6.2.12) angewandt werden, um

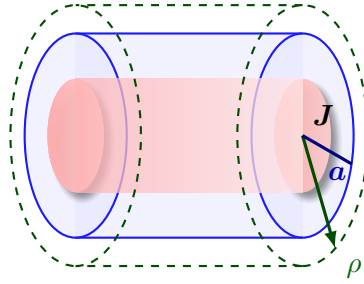
$$\int_{\partial\Omega} (\nabla \times \vec{B}) \cdot d\vec{S} = \oint_{\partial S} \vec{B} \cdot d\vec{l}$$

zu gewinnen, wobei der Kontur auf der rechten Seite, also $\partial S = \partial(\partial\Omega)$, entlang des Umfangs der Oberfläche $S = \partial\Omega$. Damit ergibt sich

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{l} = \mu_0 I. \quad (2.2.49)$$

Diese Gleichung ist als das **Ampère-Gesetz** bekannt.

Beispiel 2.2.1.9 Wir betrachten einen langen zylindrischen Leiter mit konstanter Stromdichte J innerhalb des Radius a (**Abbildung 2.6**). Da die Feldstärke aufgrund der Symmetrie unabhängig von ϕ sein muss, wählen wir einen kreisförmigen Integrationspfad. Wenn der Pfad außerhalb des Leiters liegt, wird der gesamte Strom vom Pfad eingeschlossen und das Ampère-Gesetz ergibt

Abbildung 2.6: Zylindrischer Leiter mit Radius a .

$B_\phi 2\pi\rho = \mu_0 I$. Somit ist das Feld außerhalb des Leiters

$$B_\phi = \frac{\mu_0 I}{2\pi\rho},$$

welches wie $1/\rho$ abfällt. Da dieses Ergebnis unabhängig vom Radius des Leiters ist, gilt es auch für das Feld eines Stromfilaments[¶], welches wir zuvor mit der Biot-Savart-Gleichung (2.2.1.6) abgeleitet haben.

Falls der Integrationspfad innerhalb des Leiters liegt, wird nur ein Teil des Stroms vom Pfad eingeschlossen und das Ampère-Gesetz ergibt damit

$$B_\phi 2\pi\rho = \mu_0 \frac{\pi\rho^2}{\pi a^2} I.$$

Daher ist das Feld innerhalb des Leiters

$$B_\phi = \frac{\mu_0 I \rho}{2\pi a^2} = \frac{\mu_0 J \rho}{2}, \quad (2.2.50)$$

welches linear mit dem Wachstum ρ zunimmt [C F08a].

Definition 2.2.1.10 (Faraday'sches Gesetz) Ein zeitlich veränderliches magnetisches Feld \vec{B} erzeugt in einem geschlossenen Stromkreis eine elektromotorische Kraft

$$\mathcal{E} = -\frac{d\Phi_B}{dt},$$

wobei $\Phi_B = \int \vec{B} \cdot d\vec{A}$ als magnetische Fluss (2.2.5) definiert ist.

Bemerkung 2.2.1.11 Das Faraday'sche Gesetz zeigt, dass zeitlich veränderliche Magnetfelder in Materialien wie Leitern, Eisen oder mechanischen Strukturen eine Spannung induzieren. Wenn ein geschlossener Pfad innerhalb des Materials existiert, kann diese Spannung Ströme erzeugen, die als Wirbelströme bekannt sind. Diese Wirbelströme können wiederum neue Magnetfelder erzeugen, die dem ursprünglichen Feld überlagert werden.

Definition 2.2.1.12 (ohmsches Gesetz) Das Gesetz beschreibt die Beziehung zwischen der Spannung V , dem elektrischen Strom I und dem Widerstand R in einem Leiter als $V = I \cdot R$. Für einen

[¶] Ein Stromfaden ist eine Inhomogenität in der Stromdichteverteilung seitlich der Stromflussrichtung (d. h. orthogonal zum Stromdichtevektor).

homogenen Leiter der Länge L und Querschnittsfläche A kann man die Spannung V und den Strom I über den Widerstand R nachstehend in Beziehung setzen

$$V = I \cdot R = I \cdot \frac{L}{\sigma A}, \quad (2.2.51)$$

wobei σ die Leitfähigkeit ist.

Definition 2.2.1.13 (Elektrisches Feld und Spannung) Das elektrische Feld \vec{E} ist mit der Spannung V durch $\vec{E} = -\nabla V$ verbunden. Dabei ist ∇V der Gradient des Potentials V , also die Änderung der Spannung pro Längeneinheit.

Bemerkung 2.2.1.14 Vergleicht man die Spannungen bei dem elektrischen Feld und das Ohmsche Gesetz, erhält man

$$I \cdot \frac{L}{\sigma A} = E \cdot L,$$

was sich wegen (2.2.37) wie folgt vereinfacht

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (2.2.52)$$

Definition 2.2.1.15 (Diffusionsgleichung) Ausgehend vom Faraday'schen Gesetz (2.2.1.10)

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

und durch Multiplikation beider Seiten mit der elektrischen Leitfähigkeit σ sowie anschließender Anwendung des Rotationsoperators (Curl), ergibt sich

$$\nabla \times (\nabla \times \sigma \vec{E}) = -\sigma \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{B}).$$

Verwendet man das ohmsche Gesetz (2.2.51), so erhält man

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{J}_e) = -\sigma \mu \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \vec{H}),$$

wobei \vec{J}_e die Dichte der Wirbelströme bezeichnet. Durch Anwendung der Vektoridentität (2.2.17^f) auf der linken Seite und der Beziehung $\nabla \times \vec{H} = \vec{J}$ auf der rechten Seite, erhält man

$$\nabla^2 \vec{J}_e = \sigma \mu \frac{\partial \vec{J}_e}{\partial t}. \quad (2.2.53)$$

Bemerkung 2.2.1.16 Die Gleichung (2.2.53) stellt eine Form der Diffusionsgleichung dar, wobei die Geschwindigkeit der Entwicklung der Wirbelströme durch den Faktor $\sigma \mu$ bestimmt wird.

Wendet man stattdessen den Rotationsoperator auf das Ampère'sche Gesetz an, so ergibt sich

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{H}) = \nabla \times \vec{J}_e = \sigma \nabla \times \vec{E}.$$

Durch wiederum Anwendung der Vektoridentität (2.2.17^f) auf der linken Seite und des Fara-

day'schen Gesetzes auf der rechten Seite, ergibt sich die Gleichung

$$\nabla^2 \vec{H} = \sigma \mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}.$$

Somit erfüllt auch das mit den Wirbelströmen assoziierte Magnetfeld eine Diffusionsgleichung mit derselben charakteristischen Konstante. Durch Vorgabe der zeitlichen Abhängigkeit von \vec{H} und der Geometrie der Konfiguration kann die Diffusionsgleichung zur Bestimmung der räumlichen und zeitlichen Verteilung des Magnetfeldes aufgrund der Wirbelströme gelöst werden [CFO8b].

2.3 Optimierungsproblem

Ein Optimierungsproblem hat allgemein die Form:

$$\begin{aligned} \min \quad & f_0(x) \\ \text{s. t.} \quad & f_i(x) \leq b_i, \quad i = 1, \dots, m. \end{aligned} \tag{2.3.1}$$

Hier ist der Vektor $x = (x_1, \dots, x_n)$ die Variable des Optimierungsproblems, die Funktion $f_0 : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ die **Zielfunktion**, die Funktionen $f_i : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, i = 1, \dots, m$, die Ungleichungsnebenbedingungen, und die Konstanten b_1, \dots, b_m sind die Grenzen oder Schranken für die **Nebenbedingungen**. Ein Vektor x^* wird als optimal oder als Lösung des Problems (2.3.1) bezeichnet, wenn er den kleinsten Zielfunktionswert unter allen Vektoren hat, die die Nebenbedingungen erfüllen: für jedes z mit $f_1(z) \leq b_1, \dots, f_m(z) \leq b_m$, gilt $f_0(z) \geq f_0(x^*)$.

Wir betrachten in der Regel Familien oder Klassen von Optimierungsproblemen, die durch bestimmte Formen der Ziel- und Nebenbedingungen charakterisiert sind. Ein wichtiges Beispiel ist das **lineare** Programm, bei dem die Ziel- und Nebenbedingungen f_0, \dots, f_m linear sind, d.h., sie erfüllen

$$f_i(\alpha x + \beta y) = \alpha f_i(x) + \beta f_i(y)$$

für alle $x, y \in \mathbb{R}^n$ und alle $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Wenn das Optimierungsproblem **nicht** linear ist, wird es als **nichtlineares** Programm bezeichnet.

Definition 2.3.1 Konvexe Probleme in der Optimierung haben eine Form wie

$$\operatorname{argmin}_{x \in C} f(x) \tag{2.3.2}$$

für eine konvexe Funktion $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ und eine **abgeschlossen** Konvexmenge (2.2.1), welche als Nebenbedingungs- $C \subseteq \mathbb{R}^n$ des Problems betrachtet wird [BV09].

2.3.1 Nichtlineare Programmierung

Ein nichtlineares Programm oder ein mathematisches Programm ist ein eingeschränktes Optimierungsproblem (z. B. Minimierungsproblem) der Form:

$$\begin{aligned} \min \quad & f(x) \\ \text{s. t.} \quad & g_i(x) \leq 0, \quad i = 1, \dots, r, \quad (P) \\ & h_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

wobei f , $\{g_i\}_{i=1}^r$ und $\{h_j\}_{j=1}^m$ reellwertige Funktionen sind, die auf einigen Teilmengen von \mathbb{R}^n definiert sind.

Bemerkung 2.3.1.1 Die Funktion f wird **Zielfunktion** von (P) (2.3.3) genannt, und die Ungleichungen und Gleichungen, die g_i bzw. h_j betreffen, werden als **Nebenbedingungen** des Problems bezeichnet. Die **zulässige** (engl. Feasible) Region (oder die Menge der Nebenbedingungen) von (P) (2.3.3) ist die Menge aller Punkte, die alle Nebenbedingungen erfüllen:

$$\mathcal{F}(P) = \{x \in \mathbb{R}^n : g_i(x) \leq 0, i = 1, \dots, r, h_j(x) = 0, j = 1, \dots, m\}. \quad (2.3.4)$$

Definition 2.3.1.2 Ein zulässiger Punkt $x^* \in \mathcal{F}$ wird als lokaler Minimierer von (P) bezeichnet, wenn x^* ein Minimierer von f in einer zulässigen (2.3.4) Nachbarschaft von x^* ist, d.h., es existiert ein $\epsilon > 0$ derart, dass

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{F}(P) \cap \overline{\mathbb{B}}_\epsilon(x^*).$$

Der Punkt x^* wird als globaler Minimierer von (P) (2.3.3) bezeichnet, wenn

$$f(x^*) \leq f(x) \quad \forall x \in \mathcal{F}(P).$$

Bemerkung 2.3.1.3 Die Geometrie der zulässigen Menge $\mathcal{F}(P)$ um einen lokalen Minimierer $x^* \in \mathcal{F}(P)$ bestimmt die Optimalitätsbedingungen, die x^* erfüllen muss. Wenn $g_i(x^*) < 0$ ist, spielt g_i keine Rolle bei der Bestimmung, ob x^* ein lokaler Minimierer ist und wird als **inaktiv** bezeichnet. Formal wird die Menge der **aktiven** Nebenbedingungen bei x durch $I(x) := \{i : g_i(x) = 0\}$ definiert. Ist i nicht in $I(x)$, so ist g_i eine **inaktive** Nebenbedingung bei x .

Satz 2.3.1.4 (Fritz John) Sei ein Punkt x^* ein lokaler Minimierer von (P) (2.3.3). Dann existieren Multiplikatoren $(\lambda, \mu) := (\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_r, \mu_1, \dots, \mu_m)$, die nicht alle null sind, $(\lambda_0, \lambda_1, \dots, \lambda_r) \geq 0$, so dass

$$\lambda_0 \nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^r \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0, \quad (2.3.5)$$

$$\lambda_i \geq 0, g_i(x^*) \leq 0, \lambda_i g_i(x^*) = 0, \quad i = 1, \dots, r. \quad (2.3.6)$$

Definition 2.3.1.5 (Lagrange-Funktion) Die Funktion

$$L(x; \lambda, \mu) := \lambda_0 f(x) + \sum_{i=1}^r \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x),$$

(bei $\lambda_i \geq 0, i = 0, \dots, r$) wird als **schwache** Lagrange-Funktion für (P) (2.3.3) bezeichnet. Wenn $\lambda_0 > 0$ ist, dann können wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit annehmen, dass $\lambda_0 = 1$ ist, und die resultierende Funktion,

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \sum_{i=1}^r \lambda_i g_i(x) + \sum_{j=1}^m \mu_j h_j(x), \lambda_i \geq 0, i = 1, \dots, r,$$

wird als Lagrange-Funktion bezeichnet.

Bemerkung 2.3.1.6 Die Gleichung in den FJ-Bedingungen (2.3.6) kann geschrieben werden als:

$$\nabla_x L(x, \lambda, \mu) = 0.$$

Die Bedingungen in den FJ-Bedingungen (2.3.6) werden als Komplementaritätsbedingungen bezeichnet, da $\lambda_i g_i(x^*) = 0, \lambda_i \geq 0, g_i(x^*) \leq 0$ entweder $\lambda_i = 0$ oder $g_i(x^*) = 0$ implizieren. Insbesondere, falls $g_i(x^*) < 0$, d.h. g_i bei x^* inaktiv ist, dann ist $\lambda_i = 0$.

Korollar 2.3.1.7 Sei die Vektoren $\{\nabla g_i(x^*), i \in I(x^*), \nabla h_j(x^*), j = 1, \dots, m\}$ linear unabhängig (2.2.6), dann ist $\lambda_0 > 0$ und wir haben:

$$\nabla f(x^*) + \sum_{i=1}^r \lambda_i \nabla g_i(x^*) + \sum_{j=1}^m \mu_j \nabla h_j(x^*) = 0, \quad (2.3.7)$$

$$\lambda_i \geq 0, g_i(x^*) \leq 0, \lambda_i g_i(x^*) = 0, i = 1, \dots, r, \quad (2.3.8)$$

$$h_j(x^*) = 0, j = 1, \dots, m. \quad (2.3.9)$$

Beweis. Wenn $\lambda_0 = 0$, dann ist die lineare Unabhängigkeitsannahme der Vektoren verletzt und die Multiplikatoren sind alle null, was einen Widerspruch ergibt. \square

Bemerkung 2.3.1.8 Die Bedingungen (2.3.7), (2.3.8) und (2.3.9) im Korollar (2.3.1.7) werden als die **Karush-Kuhn-Tucker (KKT)**-Bedingungen für das Problem (P) (2.3.3) bezeichnet. Die Annahme der linearen Unabhängigkeit der Gradientenvektoren (2.2.8) ist ein Beispiel für eine Nebenbedingungen-Qualifikation [Gül10d].

2.3.2 Gradientenabstiegsverfahren

Sei U eine offene Menge mit $\emptyset \neq U \subset \mathbb{R}^n$ und $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine skalare Funktion mit der stetigen partielle Ableitungen $\frac{\partial f}{\partial x_i}, i = 1, \dots, n$. Es ist zu beachten, dass solche Funktion auch Frécht differenzierbar (2.2.11) ist.

Gradientenabstieg Methoden versuchen numerisch, einen lokalen Minimierer von f iterativ zu finden, wobei sie nur die Funktionswerte und Gradienteninformationen verwenden. Sie erzeugen eine Folge von Punkten $\{x_k\}_{k=0}^{\infty} \subseteq U$, so dass, falls x_k kein lokaler Minimierer von f ist,

$$x_{k+1} = F(x_k, \nabla f(x_k))$$

für eine geeignete Funktion F , so dass

$$f(x_{k+1}) < f(x_k).$$

Somit nehmen die Funktionswerte bei jedem Schritt der Methode ab.

Definition 2.3.2.1 Sei $x \in U$ mit $\nabla f(x) \neq 0$, so dass x **kein kritischer** Punkt von f (d.h. $f'(x) \neq 0$) ist. Eine Abstiegsrichtung für f ist ein von null verschiedener Vektor $d \in \mathbb{R}^n$, so dass es ein $t > 0$ gibt mit der Eigenschaft

$$f(x + td) < f(x) \quad \forall t, 0 < t < \bar{t}.$$

Somit nimmt f entlang der Halbgeraden $\mathbb{R}_{++}d := \{x + td : t > 0\}$ für hinreichend kleine Schrittweiten $t > 0$ streng ab.

Lemma 2.3.2.2 Sei $x \in U$ ein nicht kritischer Punkt von f , und $d \in \mathbb{R}^n$ ein von null verschiedener Vektor. Wenn $\langle \nabla f(x), d \rangle < 0$ (d macht einen stumpfen Winkel mit dem Gradienten $\nabla f(x)$), dann ist d eine Abstiegsrichtung von f an x .

Umgekehrt, wenn d eine Abstiegsrichtung von f an x ist, dann $\langle \nabla f(x), d \rangle \leq 0$.

Beweis. Da f Gâteaux-differenzierbar ist,

$$f(x + td) = f(x) + t\langle \nabla f(x), d \rangle + o(t). \quad (2.3.10)$$

Somit, wenn $d, \langle \nabla f(x), d \rangle < 0$ erfüllt, dann $f(x + td) < f(x)$ für alle hinreichend kleinen $t > 0$; umgekehrt, wenn $f(x + td) < f(x)$ für alle hinreichend kleinen $t > 0$, dann ergibt das Grenzwertnehmen von $t \rightarrow 0$ in der obigen Gleichung $\langle \nabla f(x), d \rangle \leq 0$. \square

Bemerkung 2.3.2.3 Sei $x(t)$ eine Kurve auf dem Niveaumenge (**Abbildung 2.7**)

$f^{-1}(\alpha) = \{x : f(x) = \alpha\}$. Dann ergibt sich die Differenzierung der Gleichung $f(x(t)) = \alpha$

$$\langle \nabla f(x(t)), x'(t) \rangle = 0.$$

Da $x'(t)$ **tangential** (2.6.1.6) zur Niveaumenge $f^{-1}(\alpha)$ ist, sehen wir, dass der Gradient $\nabla f(x(t))$ ein Normalvektor zur Tangentialebene von $f^{-1}(\alpha)$ am Punkt x ist.

Definition 2.3.2.4 (Die Richtung des steilsten Abstiegs) Aus der Gleichung (2.3.10) haben wir:

$$f(x + td) \approx f(x) + t\langle \nabla f(x), d \rangle \quad \text{für kleine } t > 0.$$

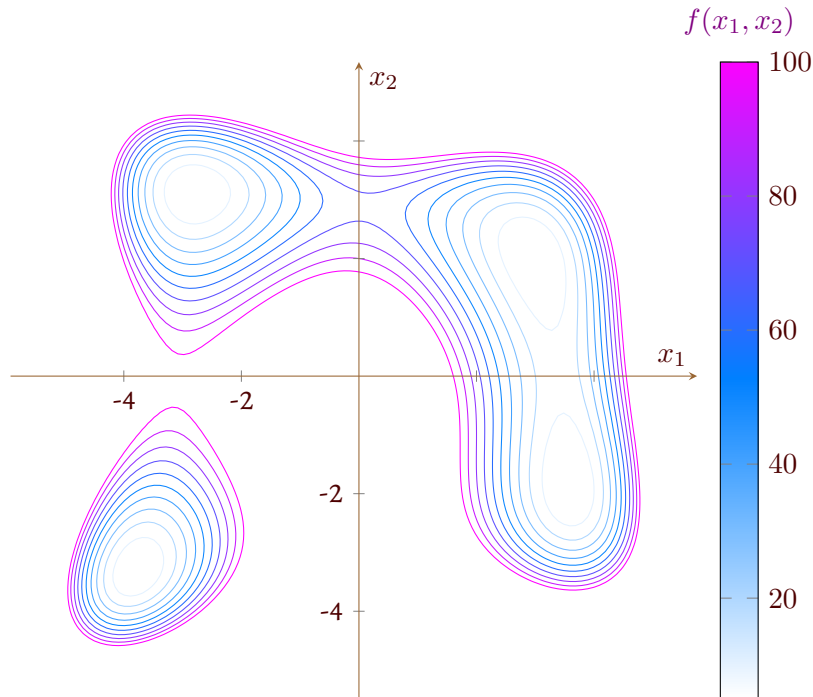


Abbildung 2.7: Die Niveaumenge der $f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$.

Somit scheint es, dass wir den größten Abstieg des Funktionswertes von f für ein festes kleines $t > 0$ erreichen können, wenn wir die Größe $\langle \nabla f(x), d \rangle$ über alle Richtungen $d \in \mathbb{R}^n$ mit $\|d\| = 1$ minimieren. Da

$$\langle \nabla f(x), d \rangle = \|\nabla f(x)\| \cdot \|d\| \cos \theta = \|\nabla f(x)\| \cos \theta,$$

würden wir $\cos(\theta) = -1$ wählen, das heißt,

$$d = -\frac{\nabla f(x)}{\|\nabla f(x)\|};$$

dies ist der Grund, warum die (**unnormalisierte**) Richtung $d = -\nabla f(x)$ als die Richtung des **steilsten** Abstiegs von f am Punkt x bezeichnet wird [Gül10b].

2.3.3 Das Newton-Verfahren

Das Newton-Verfahren (oder das Newton-Raphson-Verfahren) ist ein Verfahren zur Bestimmung von Nullstellen (2.5.12) von Gleichungssystemen. In seiner allgemeineren Form könnte es beispielsweise angewendet werden, um Lösungen einer nichtlinearen Gleichung zu finden

$$f(x) = y_0,$$

wobei $f : U \rightarrow Y$ eine differenzierbare Abbildung (2.2.11) von einer offenen Menge U in einem Banachraum (vollständig normierte Vektorräume) X in einen anderen Banachraum Y ist, und $y_0 \in Y$ einschränkt gegeben ist. Die Abbildung $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ wird in diesem Abschnitt auf einer offenen Menge $U \subset \mathbb{R}^n$ betrachtet.

Bemerkung 2.3.3.1 Wir ersetzen $f(x)$ und y_0 durch $f(x) - y_0$ bzw. durch 0. Damit wird das Newton-Verfahren als ein iteratives Verfahren hat die Form

$$x_{k+1} = x_k - \left[\underbrace{Df(x_k)}_{(\text{Jacobian})} \right]^{-1} f(x_k), \quad k \geq 0, \quad (2.3.11)$$

mit einer Anfangswert (auch Anfangslösung genannt) $x_0 \in U$. Für $n = 1$ wird das Newton-Verfahren wie folgt geschrieben

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}. \quad (2.3.12)$$

Bei einer Näherungslösung x_k ersetzen wir den Graphen der Funktion f durch ihre Tangente, nämlich

$$\ell_k(x) = f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k),$$

und bestimmen die nächste Näherungslösung x_{k+1} durch Lösen der linearen Gleichung $\ell_k(x) = 0$; das heißt, wir entwickeln $f(x)$ in einer Taylorreihe um x_k bis zum linearen Glied und setzen sie gleich null:

$$f(x) \approx f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) = 0.$$

Sei $N_f(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}$, dann ist das Newton-Verfahren für f das diskrete dynamische System, das durch Iteration von $N_f(x)$ erhalten wird, das heißt,

$$x_{k+1} = N_f(x_k).$$

Bemerkung 2.3.3.2 Wenn $f'(x) \neq 0$ ist, $0 = f(x)$ äquivalent zu $N_f(x) = x$ ist, sodass eine Nullstelle von f ein Fixpunkt von N_f ist und umgekehrt.

Angenommen, dass f'' existiert, berechnen wir

$$N'_f(x) = 1 - \frac{(f'(x))^2 - f(x)f''(x)}{(f'(x))^2} = \frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}.$$

Sei nun $f(x^*) = 0$, haben wir $N_f(x^*) = x^*$ und $N'_f(x^*) = 0$; aus der Taylor-Formel folgt

$$\begin{aligned} N_f(x) &= N_f(x^*) + N'_f(x^*)(x - x^*) + \frac{1}{2}N''_f(z)(x - x^*)^2 \\ &= x^* + \frac{1}{2}N''_f(z)(x - x^*)^2 \quad \text{für ein } z \in (x^*, x) \end{aligned}$$

Setzt man $x = x_k$ in die letzte Gleichung ein, ergält man

$$x_{k+1} = N_f(x_k) = x^* + \frac{1}{2}N''_f(z_k)(x_k - x^*)^2,$$

das heißt,

$$x_{k+1} - x^* = \frac{1}{2}N''_f(z_k)(x_k - x^*)^2.$$

Angenommen, dass x_k nahe bei x^* liegt und N''_f stetig ist, haben wir dann $\|N''_f(z_k)\| \leq M$ für ein

$M > 0$, sodass

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq M(x_k - x^*)^2. \quad (2.3.13)$$

Dies zeigt, dass das Newton-Verfahren in einer Nachbarschaft der Nullstelle x^* quadratisch konvergiert, vorausgesetzt, dass $f'(x^*) \neq 0$ ist.

Bemerkung 2.3.3.3 Sei nun $f(x) = (f_1(x), \dots, f_n(x))$ mit den Koordinatenfunktionen $f_i(x), i = 1, \dots, n$. Wieder entwickeln wir $f(x)$ in einer Taylorreihe um $x_k \in \mathbb{R}$, abgeschnitten beim linearen Glied, und bestimmen die Lösung der approximativen, linearen Abbildung. Dies kann **koordinatenweise** erfolgen:

$$f_i(x_{k+1}) \approx f_i(x_k) + \langle \nabla f_i(x_k), x_{k+1} - x_k \rangle = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

oder in der Vektornotation (2.2.7)

$$\begin{pmatrix} f_1(x_k) \\ \vdots \\ f_n(x_k) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \nabla f_1(x_k)^T \\ \vdots \\ \nabla f_n(x_k)^T \end{pmatrix} (x_{k+1} - x_k) = 0;$$

und somit als Matrix

$$f(x_k) + Df(x_k)(x_{k+1} - x_k) = 0. \quad (2.3.14)$$

Bemerkung 2.3.3.4 Wenn $Df(x_k)$ **invertierbar** ist, führt die Multiplikation der Gleichung (2.3.14) von links mit $Df(x_k)^{-1}$ wiederum zur Iteration (2.3.11) für die Lösung der $f(x) = 0$.

Lemma 2.3.3.5 Sei $f : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ eine stetig differenzierbare Funktion auf einer offenen Menge $B \subseteq \mathbb{R}^n$. Wenn $x^* \in U$ eine Nullstelle von f ist, das heißt, $f(x^*) = 0$, so dass $Df(x^*)$ invertierbar ist, dann gilt

$$f(x) = \int_0^1 Df(x^* + t(x - x^*))(x - x^*) dt.$$

Beweis. Für die Koordinatenfunktion f_i definieren wir $\alpha(t) = f_i(x^* + t(x - x^*))$. Wir haben $\alpha'(t) = \langle \nabla f_i(x^* + t(x - x^*)), x - x^* \rangle$ durch die Kettenregel. Da $\alpha(1) - \alpha(0) = \int_0^1 \alpha'(t) dt$ nach dem Fundamentalsatz der Analysis und $\alpha(1) = f_i(x)$, $\alpha(0) = f_i(x^*) = 0$, ergibt sich

$$f_i(x) = \int_0^1 \langle \nabla f_i(x^* + t(x - x^*)), x - x^* \rangle dt, \quad i = 1, \dots, n.$$

Das Lemma folgt, wenn wir diese Gleichungen in Matrixnotation schreiben. □

Satz 2.3.3.6 Sei f und x^* wie im Lemma (2.3.3.5), dann:

- a) Es existiert eine offene Kugel/offenes Ball $\mathbb{B} := \mathbb{B}_\delta(x^*)$ um x^* herum, so dass, wenn $x_0 \in \mathbb{B}$ ist, Newtons Methode, die bei x_0 gestartet wird, wohl definiert ist und die Iterationen $\{x_k\}_0^\infty$ in \mathbb{B} bleiben und superlinear gegen x^* konvergieren, das heißt:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} = 0. \quad (2.3.15)$$

b) Sei $Df(x)$ in \mathbb{B} **Lipschitz**-stetig d.h. es existiert $L > 0$, sodass

$$\|Df(y) - Df(x)\| \leq L\|y - x\| \quad \forall x, y \in \mathbb{B}, \quad (2.3.16)$$

dann konvergiert Newtons Methode quadratisch und zwar existiert dann ein $k > 0$, sodass

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq K\|x_k - x^*\|^2. \quad (2.3.17)$$

Beweis. Wir berechnen

$$\begin{aligned} x_{k+1} - x^* &= x_k - x^* - [Df(x_k)]^{-1} f(x_k) \\ &= [Df(x_k)]^{-1} [Df(x_k)(x_k - x^*) - f(x_k)] \\ &= [Df(x_k)]^{-1} \left[Df(x_k)(x_k - x^*) - \int_0^1 Df(x^* + t(x_k - x^*))(x_k - x^*) dt \right] \\ &= [Df(x_k)]^{-1} \int_0^1 [Df(x_k) - Df(x^* + t(x_k - x^*))](x_k - x^*) dt. \end{aligned}$$

Dies führt dazu, dass

$$\begin{aligned} \|x_{k+1} - x^*\| &\leq \| [Df(x_k)]^{-1} \| \cdot \|x_k - x^*\| \\ &\quad \times \int_0^1 \|Df(x_k) - Df(x^* + t(x_k - x^*))\| dt. \end{aligned}$$

Wenn nun $\| [Df(x)]^{-1} \| \leq M$ auf \mathbb{B} , und δ , welches $\mathbb{B} = \mathbb{B}_\delta(x^*)$ definiert, klein genug ist, sodass

$$\|Df(x_k) - Df(x^* + t(x_k - x^*))\| < \frac{1}{2M}, \text{ dann } \|x_{k+1} - x^*\| < \frac{\|x_k - x^*\|}{2}$$

und alle Newton-Iteration $\{x_k\}_0^\infty$ bleiben in \mathbb{B} und konvergieren geometrisch zu x^* . Da

$$\text{frac}\|x_{k+1} - x^*\|\|x_k - x^*\| \leq M \int_0^1 \|Df(x_k) - Df(x^* + t(x_k - x^*))\| dt, \quad (2.3.18)$$

und der Integrand in (2.3.18) so klein wird, als $k \rightarrow \infty$, sehen wir, dass (2.3.15) gilt. Falls Df **Lipschitz**-stetig ist, dann führen (2.3.16) und (2.3.18) zu

$$\begin{aligned} \frac{\|x_{k+1} - x^*\|}{\|x_k - x^*\|} &\leq M \int_0^1 L\|x_k - (x^* + t(x_k - x^*))\| dt \\ &= ML\|x_k - x^*\| \int_0^1 (1-t) dt \\ &= \frac{ML}{2}\|x_k - x^*\|; \end{aligned}$$

Setzt man $K = \frac{ML}{2}$, so erhält man

$$\|x_{k+1} - x^*\| \leq K\|x_k - x^*\|^2.$$

□

Definition 2.3.3.7 (Polyak-Łojasiewicz inequality) Angenommen, hat $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ eine nichtleere

Menge C^* für das Problem (2.3.2) und ist f^* die zugehörige optimale Funktionswert. Eine Funktion erfüllt die **PL** Ungleichung, falls folgende Ungleichung für eine $\mu > 0$ gilt:

$$\frac{1}{2} \|\nabla f(x)\|^2 \geq \mu (f(x) - f^*) \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Bemerkung 2.3.3.8 (Newton-Verfahren in der Optimierung) Sei $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion mit stetig zweiten partiellen Ableitungen $\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$. Ein lokaler Minimierer (oder Maximierer) $x^* \in U$ ist ein kritischer Punkt, das heißt, $\nabla f(x^*) = 0$, was bedeutet, dass x^* eine Nullstelle der Abbildung $F : U \rightarrow \mathbb{R}^n$ ist,

$$F(x) = \nabla f(x).$$

Das Newton-Verfahren, angewandt auf $F(x) = 0$, wird gegeben durch

$$x_{k+1} = x_k - DF(x_k)^{-1} F(x_k)$$

mit

$$\begin{aligned} DF(x) &= \begin{bmatrix} (\nabla F_1(x))^T \\ \vdots \\ (\nabla F_n(x))^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \right) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right) & \cdots & \frac{\partial}{\partial x_n} \left(\frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1^2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n \partial x_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 \partial x_n} & \cdots & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n^2} \end{bmatrix} = Hf(x). \end{aligned}$$

Bemerkung 2.3.3.9 Das Newton-Verfahren wird zur Bestimmung eines kritischen Punktes von f

$$x_{k+1} = x_k - [Hf(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k). \quad (2.3.19)$$

Dies ist auch mit der Taylor-Reihe verbunden:

$$\begin{aligned} f(x) &\approx f(x_k) + \nabla f(x_k)(x - x_k) \\ &\quad + \frac{1}{2}(x - x_k)^T Hf(x_k)(x - x_k) =: q(x), \end{aligned}$$

und die quadratische Funktion $q(x)$ hat das Gradienten

$$\nabla q(x) = \nabla f(x_k) + Hf(x_k)(x - x_k),$$

und der **kritische** Punkt x erfüllt $\nabla f(x_k) + Hf(x_k)(x - x_k) = 0$, das heißt,

$$[Hf(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) + \bar{x} - x_k = 0.$$

Daher gilt

$$\bar{x} = x_k - [Hf(x_k)]^{-1} \nabla f(x_k) = x_{k+1},$$

Das bedeutet, x_{k+1} ist der **kritische** Punkt der Taylor-Approximation zweiter Ordnung [Gül10c]

$$f(x_k) + \nabla f(x_k)(x - x_k) + \frac{1}{2}(x - x_k)^T H f(x_k)(x - x_k). \quad (2.3.20)$$

Definition 2.3.3.10 Ein differenzierbare Funktion heißt L -glatt, falls

$$f(y) \leq f(x) + \langle \nabla f(x), y - x \rangle + \frac{L}{2} \|y - x\|^2.$$

Mit anderen Worten, falls die erste Ableitung der Funktion f L -Lipschitz stetig ist wird die Funktion als L -glatt bezeichnet.

2.3.4 Stochastischer Gradientenabstieg

Der Stochastische Gradientenabstieg (engl. **Stochastic Gradient Descent (SGD)**) ist eine iterative Methode zur Optimierung einer Zielfunktion (2.3.1.1) mit geeigneten Glattheitseigenschaften. Er kann als stochastische Annäherung der Gradientenabstiegsoptimierung (2.3.2) betrachtet werden, da er den tatsächlichen Gradienten (berechnet aus dem gesamten Datensatz) durch eine Schätzung davon ersetzt (berechnet aus einer zufällig ausgewählten Teilmenge der Daten). Besonders bei hochdimensionalen Optimierungsproblemen reduziert dies die sehr hohe Rechenbelastung und ermöglicht schnellere Iterationen im Austausch für eine niedrigere Konvergenzrate (2.1.3.1).

Bemerkung 2.3.4.1 Wir betrachten in diesem Abschnitt das folgende stochastische Optimierungsproblem:

$$\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} f(x) = \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \mathbb{E}_{i \in I} [f_i(x)], \quad (2.3.21)$$

wobei die Hauptanwendung dieser Methoden offensichtlich in der Optimierung endlicher Summen liegt:

$$f(x) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f_i(x).$$

Im maschinellen Lernen repräsentiert f_i typischerweise die Anpassung eines Modells an ein einzelne Trainingsstichprobe (2.1.1.7).

Bemerkung 2.3.4.2 Diese Methoden sind besonders geeignet, wenn die Anzahl der Trainingsstichproben so groß ist, dass die Berechnung des Gradienten von f in jeder Iteration zu viele Ressourcen erfordert. Die Aktualisierungsregel für stochastische Gradientenmethoden lautet:

$$x_{t+1} = x_t - \alpha_t \nabla \tilde{f}_t(x_t), \quad (2.3.22)$$

wobei $\nabla \tilde{f}_t(x_t)$ eine zufällige Schätzung von $\nabla f(x_t)$ ist, sodass $\mathbb{E}[\nabla \tilde{f}_t(x_t)] = \nabla f(x_t)$. Im obigen Fall, in dem f eine Summe von Funktionen ist, kann $\nabla \tilde{f}_t(x_t) = \nabla f_{i_t}(x_t)$ sein, wobei $1 \leq i_t \leq m$ gleichmäßig zufällig ausgewählt wird. Häufiger wird jedoch der Gradient mit sogenannten Minibatches geschätzt. Dabei wird eine Menge J_t von Stichproben fester Größe gleichmäßig zufällig ausgewählt und definiert $\nabla \tilde{f}_t := \frac{1}{|J|} \sum_{j \in J} \nabla f_j(x_t)$.

Satz 2.3.4.3 Im Kontext des Problems (2.3.21) sei angenommen, dass jede Funktion f_i L -glatt (2.3.3.10) ist, f eine nicht-leere Lösungsmenge hat, f die PL-Ungleichung (2.3.3.7) erfüllt und

$$\mathbb{E} [\|\nabla f_{i_t}(x_t)\|^2] \leq D^2$$

für alle x_t und ein gewisses D . Wenn wir iterativ die Aktualisierungsregel (2.3.22) mit $\alpha_t = \frac{2\mu^2}{(t+1)^2}$ anwenden, dann erhalten wir zur optimalen Funktion f^* eine Konvergenzrate von

$$\mathbb{E} [f(x_t) - f^*] \leq \frac{LD^2}{2t\mu^2}.$$

Bemerkung 2.3.4.4 Der Satz (2.3.4.3) zeigt die Konvergenz der SGD-Methode. Dabei wurde zur Vereinfachung der Notation $\nabla \tilde{f}_t(x_t) = \nabla f_{i_t}(x_t)$ verwendet. Der Satz gilt ebenso auch für $\nabla \tilde{f}_t(x_t)$, welches $\mathbb{E}[\nabla \tilde{f}_t(x_t)] = \nabla f(x_t)$ erfüllt.

Satz 2.3.4.5 Unter den Bedingungen der Satz (2.3.4.3) erhalten wir bei der Anwendung einer konstanten Lernrate (2.1.4.10) $\alpha < \frac{1}{2\mu}$ eine Konvergenzrate von

$$\mathbb{E}[f(x_t) - f^*] \leq (1 - 2\mu\alpha)^k (f(x_0) - f^*) + \frac{LD^2\alpha}{4\mu}.$$

Algorithm 2.3.1 Adam

Require: α	learning rate
Require: $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1)$	exponential decay rates for the moment estimates
Require: $f(\theta)$	Stochastic objective
Require: x_0	Initial parameter vector
1: $m_0 \leftarrow 0$	Initialize 1st moment vector
2: $v_0 \leftarrow 0$	Initialize 2nd moment vector
3: $t \leftarrow 0$	Initialize timestep
4: while x_t not converged do	
5: $t \leftarrow t + 1$	
6: $g_{t-1} \leftarrow \nabla f_{t-1}(x_{t-1})$	Get gradients w.r.t stochastic objective at timestep t
// $g_{t-1,i} := i^{\text{th}}$ component of $\nabla f_{t-1}(x_{t-1})$	
7: for $i = 1$ to n do	
8: $m_{t,i} \leftarrow \beta_1 \cdot m_{t-1,i} + (1 - \beta_1) \cdot g_{t-1,i}$	Update biased first moment estimate
9: $v_{t,i} \leftarrow \beta_2 \cdot v_{t-1,i} + (1 - \beta_2) \cdot g_{t-1,i}^2$	Update biased second raw moment estimate
10: $\hat{m}_{t,i} \leftarrow m_{t,i} / (1 - \beta_1^t)$	Compute bias-corrected first moment estimate
11: $\hat{v}_{t,i} \leftarrow v_{t,i} / (1 - \beta_2^t)$	Compute bias-corrected second raw moment estimate
12: $x_{t,i} \leftarrow x_{t-1,i} - \alpha \cdot \hat{m}_{t,i} / (\sqrt{\hat{v}_{t,i}} + \epsilon)$	
13: end for	
14: end while	
15: return x_t	

Bemerkung 2.3.4.6 Oben ist **Adam** (Abkürzung für der englische Ausdruck **Ad**aptive **M**oment Estimation), eine adaptive Gradientenabstiegsmethode repräsentiert, die in der maschinellen Lern-Community als Optimierer für den Gradientenabstieg populär geworden ist. Dabei sind

- **Erster Moment (Mittelwert):** Dies ist der gleitende Durchschnitt der Gradienten. Es hilft, die Richtung des Gradienten zu glätten und stabile Aktualisierungen zu gewährleisten.

- **Initialisierung:** $m_0 \leftarrow 0$.
- **Aktualisierung:** $m_{t,i} \leftarrow \beta_1 \cdot m_{t-1} + (1 - \beta_1) \cdot g_{t-1,i}$.

➤ **Zweiter Moment (Varianz):** Dies ist der gleitende Durchschnitt der quadrierten Gradienten. Es hilft, die Größe der Gradienten zu normalisieren und verhindert, dass große Gradienten zu große Aktualisierungen verursachen.

- **Initialisierung:** $v_0 \leftarrow 0$.
- **Aktualisierung:** $v_{t,i} \leftarrow \beta_2 \cdot v_{t-1,i} + (1 - \beta_2) \cdot g_{t-1,i}^2$.

Adam ist also adaptiv in dem Sinne, dass die Abstände und Richtungen zwischen den Aktualisierungen anhand einer Heuristik angepasst werden, die versucht, die Geometrie der zu optimierenden Funktion zumindest lokal zu erlernen. Dabei wird die Lernrate (2.1.4.10) für jeden Parameter individuell angepasst wird, basierend auf den ersten und zweiten Momenten der Gradienten [Rub17].

2.4 Partielle Differentialgleichung

Mathematische Modellierung verbindet Mathematik und physikalische Wissenschaften, wobei mathematische Gleichungen, insbesondere partielle Differentialgleichungen, zur Formulierung physikalischer Ideen verwendet werden. Fortschritte in der Mathematik fördern wissenschaftliche Entwicklungen. Mathematische Modelle, wie Maxwell'sche Gleichungen für elektromagnetische Phänomene, basieren auf physikalischen Beobachtungen und beschreiben physikalische Systeme. Modelle können von genauen physikalischen Gesetzen bis zu konzeptuellen Modellen, wie der Ausbreitung von Krankheiten, reichen. Der Prozess der mathematischen Modellierung umfasst Beobachtung, Variablenauswahl, Gleichungsformulierung, Analyse, Simulation und Validierung. Partielle Differentialgleichungen umfassen sowohl physikalische als auch konzeptuelle Modelle. Ein ODE-Modell^{||} hat allgemein die Form (eine Kenntnis von ODE ist für Leser vorausgesetzt)

$$\frac{du}{dt} = F(t, u; r_1, \dots, r_m), \quad t > 0,$$

wobei F eine existierende funktionale Beziehung zwischen t , u , und m Parametern r_1, \dots, r_m ist. Oft beinhaltet das Modell eine Anfangsbedingung $u(0) = u_0$. Allgemeiner kann ein ODE-Modell aus einem System von n ODEs für n Zustandsvariablen $u_1(t), \dots, u_n(t)$ bestehen.

Ein PDE-Modell unterscheidet sich von einem ODE-Modell dadurch, dass die Zustandsvariable u von mehr als unabhängigen Variable beeinflusst. ODEs beschreiben die zeitliche Entwicklung eines Systems, während PDEs die Entwicklung eines Systems in Zeit und Raum modellieren. PDE-Modelle können auch zeitunabhängig sein, aber von mehreren räumlichen Variablen abhängen.

^{||} ODE leitet sich vom englischen Ausdruck 'Ordinary Differential Equation' (Gewöhnliche Differentialgleichung) ab.

Zwei Beispiele für PDEs sind [Log15]:

$$\begin{aligned} u_{tt}(x, t) - c^2 u_{xx}(x, t) &= 0 \quad (\text{Wellengleichung}), \\ u_{xx}(x, y) + u_{yy}(x, y) &= 0 \quad (\text{Laplace-Gleichung}). \end{aligned}$$

Definition 2.4.1 (Partieller Differentialoperator) Sei $M \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Teilmenge. Eine **partieller** Differentialoperator der Ordnung k ist eine Abbildung

$$L : C^k(M) \rightarrow C^0(M) \text{ mit } L(f)(x) := \sum_i \sum_{|\alpha| \leq k} a_{\alpha_i}(x) \left(\frac{\partial^\alpha f}{\partial x^\alpha}(x) \right)^i,$$

wobei $a_{\alpha_i}(x)$ für alle $\alpha \in \mathbb{N}^n$ und i stetige Funktionen (2.5.2.7) sind [Wan+21].

Beispiel 2.4.2 Wir betrachten hier die Wärmeleitungsgleichung $u_t - k u_{xx} = 0$, die mittels des Differentialoperators als

$$Lu = 0 \text{ mit } L = \frac{\partial}{\partial t} - k \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

umgeschrieben werden kann. Der Operator wirkt auf zweimal stetig differenzierbare Funktion $u = u(x, t)$ und bildet damit eine neue Funktion ab.

Bemerkung 2.4.3 Ein Differentialoperator L wird genau dann als **linear** bezeichnet, wenn er folgende Bedingung erfüllt:

$$L(u + c v) = L(u) + c L(v),$$

wobei u und v Funktionen und c eine beliebige Konstante sind. Darüber hinaus wird eine linearer Differentialoperator L als **homogen** bezeichnet, falls $Lu = 0$.

2.4.1 Klassifikation von PDEs

Definition 2.4.1.1 (Ordnung einer PDE) Die höchsten vorkommenden Ableitung einer PDE wird als Ordnung der PED angenommen. Darüber hinaus werden PDEs fast immer durch Anfangs- und/oder Randbedingungen ergänzt, die den Zustand u zur Zeit $t = 0$ und an den Schranken angeben. Beispielsweise hat eine erste und zweite Ordnung der Evolutions-PDE in einer räumlichen Variablen und der Zeit die Form

$$G(x, u, u_x, u_t) = 0, \quad x \in I, t > 0,$$

$$G(x, t, u, u_x, u_t, u_{xx}, u_{tt}, u_{xt}) = 0, \quad x \in I, t > 0, \quad (2.4.1)$$

wobei I zugehöriges Raumintervall ist, das beschränkt oder unbeschränkt sein kann.

Definition 2.4.1.2 (Lineare und Nichtlineare PDE) Die Gleichung (2.4.1) ist **linear**, wenn G eine linear Funktion in ' u ' und allen seinen Ableitungen ist; wie die unabhängigen Variablen ' x ' und ' t ' erscheinen, ist dabei irrelevant. Das bedeutet, dass die unbekannte Variable u und ihre Ableitungen allein und in erster Potenz auftreten. Andersfalls ist der PDE **nichtlinear**.

Bemerkung 2.4.1.3 Im Fall der Linearität einer PDE wird die (2.4.1) als **homogen** bezeichnet, wenn jeder Term u oder eine Ableitung von u enthält. Die Gleichung ist **inhomogen**, wenn es mindestens einen Term existiert, der nur von den unabhängigen Variablen t und x abhängt.

Beispiel 2.4.1.4 Die beiden folgenden Gleichungen zweiter Ordnung

$$u_t + uu_{xx} = 0 \text{ und } u_{tt} - u_x + \sin u = 0$$

sind nichtlinear, die erste wegen des Produkts uu_{xx} und die zweite, weil die unbekannte Variable in der nichtlinearen Sinusfunktion auftritt. Die Gleichung zweiter Ordnung

$$u_t - \sin(x^2 t) u_{xt} = 0$$

ist linear und homogen, und die Gleichung

$$u_t + 3xu_{xx} = tx^2$$

ist linear und inhomogen.

Definition 2.4.1.5 Wir rufen die PDE zweiter Ordnung (2.4.1) ins Gedächtnis zurück und formuliere diese mittels Konstanten A , B und C wie folgt um

$$Au_{xx} + Bu_{xt} + Cu_{tt} + F(x, t, u, u_x, u_t) = 0. \quad (2.4.2)$$

Die zweite Ableitungen erscheinen vorausgesetzt linear bzw. in erster Potenz. Der Ausdruck

$$Lu \equiv Au_{xx} + Bu_{xt} + Cu_{tt}$$

wird als **Hauptbestandteil** der Gleichung bezeichnet.

Definition 2.4.1.6 (Klassifikation von PDEs) Unter Diskriminante des **Hauptbestandteiles** der Gleichung (2.4.2), nämlich

$$D \equiv B^2 - 4AC,$$

wird die PDE (zweiter Ordnung)(2.4.2) wie folgt klassifiziert:

- Sei $D < 0$, so wird die Gleichung als **elliptisch** bezeichnet.
- Sei $D = 0$, so wird die Gleichung als **parabolisch** bezeichnet.
- Sei $D > 0$, so wird die Gleichung als **hyperbolisch** bezeichnet.

Bemerkung 2.4.1.7 Allgemein können die A , B , und C in der Gleichung (2.4.2) auch von den Variablen x und t abhängen (d.h. $A = a(x, t)$, $B = b(x, t)$ und $C = c(x, t)$). In diesem Fall wird Definitheit der Koeffizientenmatrix

$$H(x, t) := \begin{pmatrix} a(x, t) & \frac{b(x, t)}{2} \\ \frac{b(x, t)}{2} & c(x, t) \end{pmatrix}$$

in Betracht kommen [Lev07].

- Sei $H(x, t)$ positiv definit oder negativ definit, so heißt die Gleichung **elliptisch** im Punkt (x, t) .
- Sei $H(x, t)$ positiv semidefinit oder negativ semidefinit, aber nicht definit (singulär), so heißt die Gleichung **parabolisch** im Punkt (x, t) .
- Sei $H(x, t)$ indefinit (mit genau einem negativen Eigenwert), so heißt die Gleichung **hyperbolisch** im Punkt (x, t) .

2.5 Homologie

Die **Homologie** von **Simplizialkomplex** (Abbildung 2.8) entsteht aus einem **Randoperator**, der Orientierungen in \pm Zeichen umwandelt. Dies führt zu Kürzungen, die Berechnungen erheblich vereinfachen, beispielsweise von Euler-Zahlen, und die grundlegende algebraische Invarianten liefern.

Sei $V = \{v_1, \dots, v_N\}$ eine Menge. Die Elemente von V werden oft als **Knoten** bezeichnet. Diese Knoten können zueinander in Beziehung stehen. Das Muster dieser Beziehungen ergibt eine kombinatorische Struktur. Wir betrachten $\Sigma \subset 2^V$ die Menge aller Teilmengen von V , die einer Menge von Knoten entsprechen, die in einer Beziehung stehen. In diesem Abschnitt betrachten wir nur solche Mengen, die die Vererbungseigenschaft (engl. [hereditary property](#)) erfüllen, das heißt, wenn immer v_{i_1}, \dots, v_{i_m} in einer Beziehung stehen, dann steht auch jede Teilmenge von ihnen in einer Beziehung.

Definition 2.5.1 Eine Menge $\Sigma \subset 2^V$ mit $\emptyset \in \Sigma$ von Teilmengen von V wird als **Simplizialkomplex**^{*} bezeichnet, wenn für jedes $S' \subset S \in \Sigma$ auch $S' \in \Sigma$ gilt. Die Elemente von Σ werden als **Simplizes**

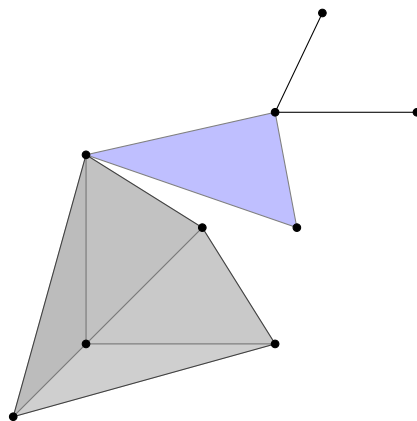


Abbildung 2.8: Ein dreidimensionaler Simplizialkomplex.

^{*} Es ist wichtig zu beachten, dass es **kombinatorische** Objekte gibt, die allgemeiner als Simplizialkomplexen sind. Ein solches Beispiel sind **Hypergraphen**, die ein breiteres Spektrum an Beziehungen und Strukturen zulassen.

bezeichnet. Genauer gesagt, wird ein $S \in \Sigma$ als **q-Simplex** bezeichnet, wenn es $q + 1$ Elemente hat. q wird dann als die Dimension des Simplexes S bezeichnet.

Definition 2.5.2 Für einen **Simplizialkomplex** Σ und $S' \subset S \in \Sigma$ wird S' als eine **Seite** von S bezeichnet und symbolisch wird als $S' < S$ dargestellt. Es wird außerdem als **Facette** von S bezeichnet, wenn $S \setminus S'$ aus einem einzigen Knoten besteht.

Definition 2.5.3 Sei Σ ein Simplizialkomplex und $S = \{v_{\sigma_0}, \dots, v_{\sigma_q}\}$ ein **q-Simplex** von Σ , dann wird die geordnete Menge $(v_{\sigma_0}, \dots, v_{\sigma_q})$ als **orientiertes q-Simplex** bezeichnet. Die Änderung der Anordnung durch eine ungerade Permutation der Knoten induziert die entgegengesetzte Orientierung. Sei ferner G eine **abelsche Gruppe**^{††} [Bos23]. Eine **q-Kette** ist eine formale lineare Kombination

$$c_q = \sum_{i=1}^m g_i \sigma_q^i \quad (2.5.1)$$

für Elemente g_i von G und q -Simplizes σ_q^i .

Bemerkung 2.5.4 Nach der oberen Definition ist dann $-\sigma$ das Simplex mit der entgegengesetzten Orientierung von σ . Wiederum sind die beiden, σ und $-\sigma$, gleichberechtigt, und $-(-\sigma) = \sigma$. In der Summe (2.5.1) haben wir dann die Beziehung

$$(-1)\sigma = -\sigma$$

, wobei -1 natürlich als ein Element von G genommen wird. Die relevanteste Gruppe ist die freie abelsche Gruppe \mathbb{Z} . Abstrakter ausgedrückt, beginnen wir mit einer abelschen Gruppe (einer freien abelschen Gruppe, wenn die Koeffizientengruppe \mathbb{Z} ist), die von den orientierten Simplizes von Σ erzeugt wird, und legen die Beziehungen $\sigma + (-\sigma) = 0$ fest.

Definition 2.5.5 Der **Rand** eines orientierten q -Simplex $\sigma_q = (v_0, v_1, \dots, v_q)$ ist die $(q-1)$ -Kette

$$\partial \sigma_q := \sum_{i=0}^q (-1)^i (v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q) \quad \text{für } q > 0, \quad (2.5.2)$$

und klar $\partial \sigma_0 = 0$ für eine 0-Kette. Hier bedeutet \hat{v}_i , dass der Knoten v_i weggelassen lässt. Der Rand der q -Kette $c_q = \sum_{i=1}^m g_i \sigma_q^i$ ist dann, durch Linearität,

$$\partial c_q := \sum_{i=1}^m g_i \partial \sigma_q^i. \quad (2.5.3)$$

Wenn wir betonen wollen, dass ∂ auf q -Ketten gerichtet ist, schreiben wir ∂_q .

Definition 2.5.6 Die q -Kette c_q wird als **geschlossen** oder äquivalent als **Zyklus** bezeichnet, wenn

$$\partial_q c_q = 0.$$

^{††} Eine Menge G , welche jedem Paar $(a, b) \in G \times G$ genau ein Element $a \circ b \in G$ zugeordnet ist, heißt abelsche Gruppe, wenn für die Operation $\circ : G \times G \rightarrow G$ mit $(a, b) \mapsto a \circ b$ folgende Bedingungen erfüllt sind:

1. $a \circ (b \circ c) = (b \circ a) \circ c \quad \forall a, b, c \in G$
2. Zu jedem $a \in G$ gibt es ein $a^{-1} \in G$ mit $a \circ a = e$ & $a \circ e = a \quad \forall a \in G$.

Die q -Kette c_q wird als **Rand** bezeichnet, wenn es eine $(q + 1)$ -Kette γ_{q+1} gibt mit

$$\partial_{q+1}\gamma_{q+1} = c_q.$$

Satz 2.5.7

$$\partial_{q-1}\partial_q = 0 \quad \text{für alle } q. \quad (2.5.4)$$

Wir werden diese fundamentale Beziehung üblicherweise als

$$\partial^2 = 0$$

abkürzen.

Beweis. Wegen der Linearität bzw. (2.5.3) genügt es zu zeigen, dass

$$\partial\partial\sigma_q = 0$$

für jedes orientierte q -Simplex. Da $C_s(\Sigma, G) = 0$ für $s < 0$ ist, müssen wir nur den Fall $q \geq 2$ betrachten. Für $\sigma_q = (v_0, \dots, v_q)$ haben wir

$$\begin{aligned} \partial\partial\sigma_q &= \partial \sum_{i=0}^q (-1)^i (v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q) = \sum_{i=0}^q (-1)^i \partial(v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q) \\ &= \sum_{i=0}^q (-1)^i \left(\sum_{j=0}^{i-1} (-1)^j (v_0, \dots, \hat{v}_j, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q) + \sum_{j=i+1}^q (-1)^{j-1} (v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, \hat{v}_j, \dots, v_q) \right) \\ &= \sum_{j<i} (-1)^{i+j} (v_0, \dots, \hat{v}_j, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q) + \sum_{j>i} (-1)^{i+j-1} (v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, \hat{v}_j, \dots, v_q), \end{aligned}$$

und das Vertauschen von i und j in der letzten Summe ergibt das Ergebnis. \square

Definition 2.5.8 Die Quotientengruppe

$$H_q(\Sigma, G) := \frac{\ker \partial_q}{\operatorname{im} \partial_{q+1}} \quad (2.5.5)$$

wird als die q -te Homologiegruppe (mit Koeffizienten in G) des Simplizialkomplexes Σ bezeichnet. Sei nun G ein **Körper**^{††} [Bos23]. Dann werden die $C_q(\Sigma, G)$ zu Vektorräumen über G , und ebenso die $H_q(\Sigma, G)$.

Definition 2.5.9 Sei Σ ein Simplizialkomplex und G ein Körper. Die **Dimension** von $H_q(\Sigma, G)$ wird als die q -te **Bettizahl** von Σ (mit Koeffizienten in G) bezeichnet und mit $b_q(\Sigma)$ notiert. Die

^{††} Eine Menge K mit **binäre Operationen** „+“ und „·“ (für Addition und Multiplikation) wird als ein Körper bezeichnet, falls die folgende Bedingungen erfüllt sind:

1. $(K, +)$ und $(K \setminus \{0\}, \cdot)$ sind **abelsche** Gruppen mit dem neutralen Element „0“ bzw. „1“.
2. $a \cdot (b + c) = a \cdot b + a \cdot c$ & $(a + b) \cdot c = a \cdot c + b \cdot c \quad \forall a, b, c \in K$.

Euler-Charakteristik von Σ ist

$$\chi(\Sigma) = \sum_q (-1)^q b_q(\Sigma) \text{ [J23i]}.$$

Definition 2.5.10 Ein gerichteter Hypergraph Σ , (Ein Graph, deren Kanten nicht nur 2 sondern mehrere Knoten gleichzeitig miteinander verbinden) mit der Knotenmengen $V = \{v_1, \dots, v_N\}$ wird als **Hyperkomplex** bezeichnet, wenn die folgenden Bedingungen erfüllt sind. Für jedes $S \in \Delta$ mit mehr als einem Element gibt es eine nichtleere Menge $b(S) = \{S_1, \dots, S_k\} \subset \Delta$ von nichtleeren Hyperseiten von S , die als Hyperfacetten von S , wie folgt, bezeichnet werden

$$S = \bigcup_{i=1}^k S_i.$$

Für einen Knoten $v \in V$ setzen wir $b(\{v\}) = \emptyset$. Außerdem verlangen wir, dass es einen Randoperator $\partial : C(\Delta, M) \rightarrow C(\Delta, M)$ gibt, der für jedes $S \subset \Delta$ einen Homomorphismus induziert

$$\partial(S) : C(S, M_S) \rightarrow C(b(S), M_{b(S)}).$$

Bemerkung 2.5.11 In der letzten Definition $M_{b(S)}$ die Menge der **Monoide**¹, die den Elementen von $b(S)$ zugeordnet sind. Dieser Operator erfüllt dann $\partial(\{v_j\}) = 0$ für alle Knoten v_j , weil $b(v) = \emptyset$ und $C(\emptyset, M_\emptyset)$ das triviale Monoid ist.

Definition 2.5.12 (Nullraum) • Für ein Gruppenhomomorphismus (Abbildungen zwischen Gruppen) $f : G \rightarrow H$ wird die Menge $\{g \in G \mid f(g) = e_H\}$ als **Kern** (2.5.12) f bezeichnet. Dabei ist e_H neutrale Element von H d.h.

$$e \circ h = h \circ e = h \quad \forall h \in H.$$

- Ist $f : V \rightarrow W$ eine lineare Abbildung (2.4.3) von Vektorräumen, dann heißt die Menge

$$\ker f := \{v \in V \mid f(v) = 0 \in W\}$$

der Kern oder **Nullraum** von f .

Korollar 2.5.13 Ein Simplicialkomplex ist somit ein Hyperkomplex, dessen Menge von Hypersimplizes nach der Anzahl der Knoten graduiert ist. Der Randoperator verringert den Gradierungsindex um 1.

$$\partial \circ \partial = \sum_{i=1}^k \partial(S_i) \circ \partial(S) = 0,$$

¹ Ein Monoid M ist eine Menge, die mit einer Operation nämlich Addition $(g, h) \mapsto g + h$ für $g, h \in M$ folgende Eigenschaften besitzt:

- a. **Assoziativ:** $(g + h) + k = g + (h + k)$
- b. **Neutral Element:** $g + e = e + g = g$.

und dabei werden die Homologie von Hyperkomplex Σ definiert durch

$$H(\Sigma, M_\Sigma) := \frac{\ker \partial}{\operatorname{im} \partial} \quad [\text{J23e}].$$

2.5.1 Kategorientheorie

Die Kategorientheorie ist eine abstrakte Theorie von Beziehungen zwischen Objekten. Sie ermöglicht in Bezug auf seiner Abstraktionsebene die wichtigsten funktionalen Merkmale verschiedener mathematischer Theorien auf einheitliche Weise behandelt zu werden. Mit Konzepten der Kategorientheorie können wir Dinge noch abstrakter formulieren.

Definition 2.5.1.1

- **Morphismen:** Kategorie \mathcal{C} besteht aus Objekten A, B, C, \dots und Morphismen (engl. arrows or morphisms)

$$f : A \rightarrow B$$

zwischen Objekten.

- **Komposition:** Morphismen können zusammengesetzt werden, das heißt, gegeben $f : A \rightarrow B$ und $g : B \rightarrow C$, gibt es ein Morphismus

$$g \circ f : A \rightarrow C.$$

- **Assoziativ:** Die Komposition ist **assoziativ**, das heißt,

$$h \circ (g \circ f) = (h \circ g) \circ f$$

- **Identitätsmorphimus:** Für $f : A \rightarrow B, g : B \rightarrow C, h : C \rightarrow D$. Für jedes Objekt A haben wir den Identitätsmorphimus

$$1_A : A \rightarrow A,$$

der die Bedingung

$$f \circ 1_A = f = 1_B \circ f$$

für alle $f : A \rightarrow B$ erfüllt.

- **Isomorphismus:** Die Objekte A und B sind **isomorph**, wenn es Morphismen $f : A \rightarrow B$ und $g : B \rightarrow A$ gibt mit

$$g \circ f = 1_A \text{ und } f \circ g = 1_B.$$

- **Automorphismen:** Morphismen $\phi : A \rightarrow A$ mit inversen Morphismen $\gamma : A \rightarrow A$, d.h. $\phi \circ \gamma = \gamma \circ \phi = 1_A$. werden als **nichttriviale** Automorphismen bezeichnet

Bemerkung 2.5.1.2 Das Grundprinzip der Kategorientheorie ist es, Objekte durch ihre Morphismen zu **charakterisieren** bzw. zu identifizieren, was ihre Beziehungen zu anderen Objekten derselben Kategorie betrifft. Daher möchte man zwischen zwei isomorphen Objekten nicht unterscheiden. Es ist jedoch wichtig zu erkennen, dass die Isomorphismen nicht eindeutig und daher nicht kanonisch sein müssen. Da **Automorphismen** also invertierbar sind und zusammengesetzt werden können, bilden sie eine Gruppe, nämlich Automorphismengruppe von A .

Definition 2.5.1.3 Ein **kommutatives** Diagramm ist ein System von Morphismen wie

$$\begin{array}{ccc} A & \xrightarrow{f} & B \\ g \downarrow & & \downarrow h \\ C & \xrightarrow{k} & D \end{array}$$

mit

$$g \circ k = h \circ f,$$

das heißt, es macht keinen Unterschied, welche Folge von Morphismen man folgt, um von der Domäne A zum Ziel D zu gelangen.

Definition 2.5.1.4 (Monoiden) Eine Sequenz

$$\cdots \longrightarrow A_{i-1} \xrightarrow{j_{i-1}} A_i \xrightarrow{j_i} A_{i+1} \longrightarrow \cdots$$

von Homomorphismen von kommutativen **g-Monoiden** wird als **exakt** bezeichnet, wenn

$$\mathbf{im} \, j_i = \mathbf{ker} \, j_{i+1} \quad \forall i.$$

Bemerkung 2.5.1.5 Betrachten wir einige spezielle Fälle dieser Definition. Eine exakte Sequenz, bei der 0 der triviale Monoid ist,

$$0 \longrightarrow A \xrightarrow{j} B$$

bedeutet einfach, dass j **injektiv** ist, da das Bild von 0 , 0 ist und daher der **Kern** von j , 0 ist. Ebenso bedeutet eine exakte Sequenz

$$A \xrightarrow{j} B \longrightarrow 0,$$

dass j **surjektiv** ist, weil der Kern der Abbildung zu 0 ganz B ist und somit das Bild von j .

Definition 2.5.1.6 Sei \mathcal{C} eine Kategorie. Die Kategorie \mathcal{C}^{op} hat dieselben Objekte wie \mathcal{C} , aber die Pfeile gehen in die entgegengesetzte Richtung. Das heißt, ein Morphismus $f : A \rightarrow B$ in \mathcal{C} entspricht dem Morphismus $f^* : B \rightarrow A$ in \mathcal{C}^{op} .

Definition 2.5.1.7 Seien \mathcal{C} und \mathcal{D} Kategorien. Ein **Funktor** $F : \mathcal{C} \rightarrow \mathcal{D}$ ordnet Objekte und Morphismen von \mathcal{C} Objekten und Morphismen von \mathcal{D} zu, wobei

$$F(f : A \rightarrow B) \text{ gegeben ist durch } F(f) : F(A) \rightarrow F(B),$$

$$F(g \circ f) = F(g) \circ F(f),$$

$$F(1_A) = 1_{F(A)},$$

für alle Objekte A, B und alle Morphismen f, g von \mathcal{C} .

Lemma 2.5.1.8 Sei **Simp** als die Kategorie der Simplizialkomplexen und **Ab** als die Kategorie der abelschen Gruppen. Für jedes q und jede abelsche Gruppe G ist

$$H_q(\Sigma, G) : \mathbf{Simp} \rightarrow \mathbf{Ab}$$

$$\Sigma \mapsto H_q(\Sigma, G)$$

ein Funktor von der Kategorie der Simplizialkomplexen zur Kategorie der abelschen Gruppen.

Beweis. Per Definition werden Objekte von **Simp** auf Objekte von **Ab** abgebildet. Wir müssen zeigen, dass auch Morphismen auf Morphismen abgebildet werden. Das erfordert den Nachweis, dass eine simpliziale Abbildung $s : \Sigma_1 \rightarrow \Sigma_2$ einen Gruppenhomomorphismus $H_q(s) : H_q(\Sigma_1, G) \rightarrow H_q(\Sigma_2, G)$ induziert, der die entsprechenden Kompositionseigenschaften besitzt. Dies folgt aus dem folgenden wichtigen Ergebnis, das besagt, dass wir von Kettenabbildungen zu Quotienten übergehen können, um Abbildungen $H_q(s)$ der Homologiegruppen zu erhalten. \square

Lemma 2.5.1.9 Die induzierten Abbildungen $C_q(s) : C_q(\Sigma_1, G) \rightarrow C_q(\Sigma_2, G)$ auf Ketten kommutieren mit den Randoperatoren. Das heißt, das Diagramm

$$\begin{array}{ccc} C_q(\Sigma_1, G) & \xrightarrow{C_q(s)} & C_q(\Sigma_2, G) \\ \partial \downarrow & & \downarrow \partial \\ C_{q-1}(\Sigma_1, G) & \xrightarrow{C_{q-1}(s)} & C_{q-1}(\Sigma_2, G) \end{array}$$

kommutiert.

Hierbei setzen wir $C_q(s)(\sigma_q) = 0$, wenn s **nicht** injektiv auf den Knoten eines q -Simplex σ_q von Σ_1 ist, das heißt, wenn $s(\sigma_q)$ eine kleinere Dimension als q hat. Die Kommutativität des Diagramms (2.5.1.3) besagt $\partial C_q(s)(\sigma_q) = C_{q-1}(s)(\partial \sigma_q)$ für jedes q -Simplex $\sigma_q = (v_0, \dots, v_q)$. Das Lemma besagt dann, dass **geschlossene** Ketten auf geschlossene Ketten und Ränder auf Ränder abgebildet werden, und daher erhalten wir die induzierten Abbildungen auf den Homologiegruppen.

Beweis. Um (2.5.1.3) zu zeigen, beobachten wir zunächst, dass, wenn alle Bilder $s(v_i)$ unterschiedlich sind, das (2.5.1.3) klar ist. Lassen Sie also zwei Bilder zusammenfallen, z.B. $s(v_0) = s(v_1)$. Dann ist $C_q(s)(\sigma_q) = 0$, daher auch $\partial C_q(s)(\sigma_q) = 0$. Andererseits, für $\partial \sigma_q = (v_1, v_2, \dots, v_q) - (v_0, v_2, \dots, v_q) + \sum_{i=2}^q (v_0, v_1, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q)$, haben die ersten beiden Terme in der Summe dasselbe Bild unter $C_{q-1}(s)$, während die anderen Terme auf 0 abgebildet werden. Daher ist in diesem Fall auch $C_{q-1}(s)(\partial \sigma_q) = 0$. \square

Definition 2.5.1.10 Eine Kategorie \mathcal{C} wird als lokal klein bezeichnet, wenn für beliebige zwei Objekte D, C die Sammlung

$$\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(D, C)$$

von Morphismen $D \rightarrow C$ eine Menge ist. In diesem Fall wird sie als Hom-Menge bezeichnet.

Definition 2.5.1.11 Ein Funktor $P : \mathcal{C}^{\mathrm{op}} \rightarrow \mathbf{Sets}$, das heißt, ein Element P der Funktorkategorie $\mathbf{Sets}^{\mathcal{C}^{\mathrm{op}}}$, wird als Vorsprung (engl. presheaf) auf \mathcal{C} bezeichnet. Für ein Morphismus $f : V \rightarrow U$ in \mathcal{C} sei $P(f) : P(U) \rightarrow P(V)$ sein Bild unter P (beachten Sie die Umkehrung der Richtung, da wir von \mathcal{C} zu $\mathcal{C}^{\mathrm{op}}$ gehen). Für $x \in P(U)$ wird der Wert $P(f)(x)$ als die Einschränkung von x entlang f bezeichnet.

Definition 2.5.1.12 Für ein Objekt C von \mathcal{C} wird ein Funktor der Form

$$\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, C) : \mathcal{C}^{\mathrm{op}} \rightarrow \mathbf{Sets}$$

als **repräsentierbar** bezeichnet.

Satz 2.5.1.13 Seien C, C' Objekte der Kategorie \mathcal{C} . Sie sind genau dann **isomorph**, wenn die Funktoren $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, C)$ und $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, C')$ isomorph sind. Allgemeiner entsprechen die Morphismen zwischen den Funktoren $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, C)$ und $\mathrm{Hom}_{\mathcal{C}}(-, C')$ den Morphismen zwischen C und C' . Dann bilden je nach dem Morphismen C und C' einen **feiner Modulraum**.

Bemerkung 2.5.1.14 Der obere Satz drückt das Grundprinzip der Kategorientheorie aus und begründet es Theorie, dass Objekte einer Kategorie durch ihre Morphismen mit anderen Objekten dieser Kategorie charakterisiert, oder besser, identifiziert werden können [JJ23b].

2.5.2 Topologische Räume

Das Konzept eines topologischen Raums basiert auf einem **qualitativen** Konzept der Nähe, das formal in der Vorstellung einer offenen Menge **kodiert** ist, im Gegensatz zu den **quantitativen** Eigenschaften einer **Metrik**. Insbesondere ist das Konzept der Stetigkeit von solcher qualitativen Natur.

Definition 2.5.2.1 Eine Menge X wird als topologischer Raum bezeichnet, wenn sie eine Sammlung $\mathcal{O}(X) \subset 2^X$ von offenen Teilmengen besitzt, die die folgenden Bedingungen erfüllt:

- a. $X \in \mathcal{O}(X)$.
- b. $\emptyset \in \mathcal{O}(X)$.
- c. Wenn $U, V \in \mathcal{O}(X)$, dann auch $U \cap V \in \mathcal{O}(X)$.
- d. Für jede Menge $(U_i)_{i \in I} \subset \mathcal{O}(X)$ gilt auch $\bigcup_{i \in I} U_i \in \mathcal{O}(X)$.

Definition 2.5.2.2

- **Abgeschlossen:** Eine Teilmenge $A \subset X$ wird als **abgeschlossen** bezeichnet, wenn ihr Komplement $X \setminus A$ offen ist.
- **Nachbarschaft:** Für $x \in X$ wird eine offene Menge U mit $x \in U$ als **Nachbarschaft** von x bezeichnet.
- **Induktion:** Wenn $S \subset X$ ist, **induziert** eine Topologie auf X eine Topologie auf S , indem $U \cap S$ als offen erklärt wird, wann immer U eine offene Teilmenge von X ist.
- **Zusammenhängendheit:** Der topologische Raum X ist **zusammenhängend**, wenn es keine zwei disjunkten nichtleeren offenen Mengen U, V gibt, mit $U \cup V = X$.
- **Ordnung:** Eine Relation (Beziehung zwischen Dingen) \leq auf einer Menge \mathbf{X} wird (**schwach**) **Ordnung** genannt, falls folgende Bedingungen

- $x \leq x$ (Reflexivität)
- $x \leq x \wedge y \leq x \Rightarrow x = y$ (Antisymmetrie)
- $x \leq y \wedge y \leq z \Rightarrow x \leq z$ (Transitivität)
- $x \leq y \vee y \leq x \Rightarrow x \leq z$ (Totalität)

für alle $x, y, z \in \mathbf{X}$ erfüllt sind.

- **Beschränktheit:** Sei \mathbf{X} durch die Relation \leq Menge und \mathbf{S} eine ihrer Teilmenge.
 - Einen Element $b \in \mathbf{X}$ heißt **obere Schranke** von \mathbf{S} , falls gilt: $\forall x \in \mathbf{S} : x \leq b$. Wenn eine solche obere Schranke b existiert, heißt \mathbf{S} nach oben beschränkt.
 - Einen Element $a \in \mathbf{X}$ heißt **untere Schranke** von \mathbf{S} , falls gilt: $\forall x \in \mathbf{S} : a \leq x$. Wenn eine solche untere Schranke a existiert, heißt \mathbf{S} nach unten beschränkt.
 - Eine Menge \mathbf{S} , die sowohl nach oben als auch unten beschränkt wird (bzgl. der Relation \leq) als **beschränkte** Menge bezeichnet.

Bemerkung 2.5.2.3 Wenn X zusammenhängend ist, die einzigen Mengen, die sowohl offen als auch geschlossen sind, X selbst und \emptyset . In der Tat, wenn U offen und geschlossen ist, dann ist ihr Komplement $V = X \setminus U$ ebenfalls offen und geschlossen, und wenn U nicht leer ist, dann würde $U \cup (X \setminus U) = X$ die Zusammenhängendheit widersprechen.

Definition 2.5.2.4 Der topologische Raum X wird als **Hausdorff** bezeichnet, wenn beliebige zwei Punkte $x \neq y \in X$ disjunkte Nachbarschaften besitzen, das heißt, es existieren $U_x, U_y \in \mathcal{O}(X)$ mit $x \in U_x, y \in U_y, U_x \cap U_y = \emptyset$.

Bemerkung 2.5.2.5 Die Hausdorff-Eigenschaft ist eine sehr grundlegende Eigenschaft. Im Wesentlichen bedeutet sie, dass die Struktur von X als Menge, eine Sammlung von Punkten, und als topologischer Raum, als eine Familie von offenen Mengen, miteinander kompatibel sind. Das heißt, die Familie der offenen Mengen ist reich genug, um verschiedene Punkte in X zu trennen oder zu unterscheiden.

Lemma 2.5.2.6 Sei X ein Hausdorff-topologischer Raum. Dann ist jede Ein-Punkt-Menge $\{x\}$ für $x \in X$ abgeschlossen.

Beweis. Für jedes $y \neq x$ existiert nach der Hausdorff-Eigenschaft eine offene Menge U_y mit $y \in U_y$ und $x \notin U_y$. Dann ist

$$X \setminus \{x\} = \bigcup_{y \neq x} U_y$$

offen, und daher ist ihr Komplement $\{x\}$ abgeschlossen. \square

Definition 2.5.2.7 Eine Abbildung $f : X \rightarrow Y$ ist **stetig**, wenn das Urbild $f^{-1}(U)$ jeder offenen Teilmenge U von Y eine offene Teilmenge von X ist. $f : X \rightarrow Y$ ist ein **Homöomorphismus**, wenn es eine stetige Abbildung $g : Y \rightarrow X$ mit

$$g \circ f = \text{id}_X \quad \text{und} \quad f \circ g = \text{id}_Y,$$

X und Y werden dann als **homöomorph** bezeichnet [JJ23].

2.5.3 Singuläre Homologie

Während Simplicialkomplexen mit **simplizialer** Homologie analysiert werden, ist die **singuläre** Homologie das geeignete Werkzeug für topologische Räume. Anstatt Simplizes als kombinatorische Objekte zu betrachten, geometrisiert sie diese, indem sie sie als Simplizes im euklidischen Raum realisiert und dann topologische Räume durch ihre kontinuierlichen Bilder untersucht. Es gibt ein weiteres Schema zur Konstruktion der Homologie eines topologischen Raums. Dies ist die singuläre Homologie, die wir nun kurz beschreiben werden. Der Übergang von der simplizialen zur singulären Homologie erfordert einen konzeptionellen Wechsel. Wir werden Simplizes nicht mehr als kombinatorische Objekte betrachten, sondern als topologische Räume. Solche topologischen Simplizes, oder genauer gesagt, ihre Bilder unter kontinuierlichen Abbildungen, werden nun als grundlegende Bausteine topologischer Räume genommen. Somit übersetzen wir die Terminologie der Simplicialkomplexen vom kombinatorischen in den topologischen Bereich.

Proposition 2.5.3.1 Sei $D \subseteq \mathbb{R}^n$ ein kompakte konvexe Teilmenge (2.2.1) mit nichtleere Innere (2.2.2). Dann heißt D ein abgeschlossene n -Zelle und ihr Inneres ist ein offene n -Zelle [M L11a]. gegeben sei jeder Punkt $p \in \text{Int}(D)$. Es existiert dann in der Tat ein Homöomorphismus (2.5.2.7) $F : \mathbb{B}^n \rightarrow D$, welches 0 zum p und \mathbb{B}^n zum $\text{Int}(D)$ und \mathbb{S}^{n-1} zum Rand ∂D zugeordnet. Dabei sind \mathbb{B}^n die Einheitskugeln und \mathbb{S}^{n-1} sphärische Oberfläche in \mathbb{R}^n .

Definition 2.5.3.2 (Affiner Unterraum) Sei $S \subseteq \mathbb{R}^n$ ein linearer Unterraum und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, dann wird die Menge

$$\mathbf{b} + S = \{\mathbf{b} + \mathbf{x} \mid \mathbf{x} \in S\}$$

als affiner Unterraum von \mathbb{R}^n parallel zu S bezeichnet. Ein affiner Unterraum $\mathbf{b} + S$ ist ein linearer Unterraum genau dann, wenn er \mathbf{o} enthält, was genau dann der Fall ist, wenn $\mathbf{b} \in S$. Es ist einfach zu überprüfen, dass $\mathbf{b} + S = \mathbf{b}' + S'$ genau dann gilt, wenn $S = S'$ und $\mathbf{b} - \mathbf{b}' \in S$.

Definition 2.5.3.3 (Affine Unabhängigkeit) Sei $\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k$ sind $k + 1$ verschiedene Punkte in \mathbb{R}^n . Solange $n \geq k$, zeigt die elementare lineare Algebra, dass es immer einen k -dimensionalen affinen Unterraum von \mathbb{R}^n gibt, der $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ enthält. Zum Beispiel, wenn S irgendein k -dimensionaler linearer Unterraum ist, der $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$ enthält, dann ist $\mathbf{v}_0 + S$ ein solcher Raum. Wir sagen, dass die Menge $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ affin unabhängig ist (oder in allgemeiner Position liegt), wenn sie nicht in irgendeinem affinen Unterraum von Dimension streng kleiner als k enthalten ist.

Satz 2.5.3.4 Für $k + 1$ verschiedene Punkte $\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k \in \mathbb{R}^n$ sind die folgenden Aussagen äquivalent:

- (a) Die Menge $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ ist affin unabhängig.
- (b) Die Menge $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$ ist linear unabhängig (2.2.6).
- (c) Wenn c_0, \dots, c_k reale Zahlen sind, so dass

$$\sum_{i=0}^k c_i \mathbf{v}_i = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{i=0}^k c_i = 0,$$

dann gilt $c_0 = \dots = c_k = 0$.

Beweis. (a) \Leftrightarrow (b): Sei $S \subseteq \mathbb{R}^n$ die lineare Hülle von $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$. Wenn $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$ eine linear abhängige Menge ist, dann ist $\mathbf{v}_0 + S$ ein affiner Unterraum der Dimension kleiner als k , der $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ enthält. Umgekehrt, wenn A irgendein affiner Unterraum der Dimension kleiner als k ist, der $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ enthält, dann ist $(\mathbf{v}_0) + A$ ein linearer Unterraum derselben Dimension, der S enthält, so dass die Menge $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$ linear abhängig ist.

(b) \Leftrightarrow (c): Angenommen, die Gleichungen (5.2) gelten für einige c_0, \dots, c_k nicht alle null. Da dann $c_0 = -\sum_{i=1}^k c_i$, haben wir

$$\sum_{i=1}^k c_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{v}_0) = \sum_{i=1}^k c_i \mathbf{v}_i - \left(\sum_{i=1}^k c_i \right) \mathbf{v}_0 = \sum_{i=1}^k c_i \mathbf{v}_i + c_0 \mathbf{v}_0 = 0.$$

Damit ergibt sich es, dass die Menge $\{\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k - \mathbf{v}_0\}$ linear abhängig ist. Die Umkehrung ist analog. \square

Definition 2.5.3.5 (Simplex) Sei $\{\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k\}$ eine affin unabhängige Menge von $k + 1$ Punkten in \mathbb{R}^n . Das von ihnen aufgespannte Simplex (siehe auch Definition 2.5.3), bezeichnet durch $[\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k]$, ist die Menge

$$[\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k] = \left\{ \sum_{i=0}^k t_i \mathbf{v}_i \mid t_i \geq 0 \text{ und } \sum_{i=0}^k t_i = 1 \right\}$$

mit der Unterraumtopologie. Für jeden Punkt $\mathbf{x} = \sum_{i=0}^k t_i \mathbf{v}_i \in [\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k]$ werden die Zahlen t_i als **baryzentrische** Koordinaten des Punktes \mathbf{x} bezüglich $[\mathbf{v}_0, \dots, \mathbf{v}_k]$, $\mathbf{x} = \sum_{i=0}^k t_i \mathbf{v}_i$ bezeichnet.

Bemerkung 2.5.3.6 Seien $e_0 = (1, 0, \dots, 0), e_1 = (0, 1, 0, \dots, 0), \dots, e_q = (0, 0, \dots, 0, 1)$ die Standard-Einheitsvektoren in \mathbb{R}^{q+1} . Das (topologisch) **standard q -Simplex** Δ_q der Dimension q ist

$$\Delta_q := \{x \in \mathbb{R}^{q+1} : x = \sum_{i=0}^q \lambda_i e_i, 0 \leq \lambda_i \leq 1, \sum_{i=0}^q \lambda_i = 1\} \quad (2.5.6)$$

Die i -te Facette Δ_{q-1}^i von Δ_q ist das $(q-1)$ -Simplex, das aus allen $x \in \Delta_q$ besteht, für die $\lambda_i = 0$ gilt, und der (topologische) **Rand** $\partial\Delta_q$ ist die Vereinigung aller Facetten von Δ_q . Somit besteht er aus allen $x \in \Delta_q$, für die mindestens eine der λ_j verschwindet.

$$\begin{aligned} \delta_{q-1}^i : \Delta_{q-1} &\longrightarrow \Delta_{q-1}^i \subset \Delta_q \\ e_0 &\longmapsto e_0, \dots, e_{i-1} \longmapsto e_{i-1}, e_i \longmapsto e_{i+1}, \dots, e_{q-1} \longmapsto e_q \end{aligned} \quad (2.5.7)$$

bildet das $(q-1)$ -dimensionale Simplex bijektiv und linear auf die i -te Facette des q -dimensionalen Simplex ab.

Proposition 2.5.3.7 Eine abgeschlossene q -Zelle kann (2.5.3.1) durch q -Simplex realisiert werden.

Definition 2.5.3.8 (Affine Abbildung) Gegeben sei zwei affine Räume (2.5.3.2) $\mathcal{A} \in \mathbb{R}^n$ und $\mathcal{B} \in \mathbb{R}^m$. Eine Abbildung $F : \mathcal{A} \longrightarrow \mathcal{B}$ heißt affin, falls jede Abbildung in der Form $F(x) = c + L(x)$ representiert werden kann, wobei L eine lineare Abbildung (2.4.3) und c ein fester Vektor ist.

Proposition 2.5.3.9 Sei $\Delta = [v_0, \dots, v_k]$ ein k -Simplex in \mathbb{R}^n . Gegeben seien $k+1$ Punkte $w_0, \dots, w_k \in \mathbb{R}^m$. Dann existiert eine eindeutige Abbildung $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^m$, die die Restriktion einer affinen Abbildung ist und v_i auf w_i für jedes i abbildet.

Beweis. Durch Abbildung $x \mapsto x - v_0$ und $y \mapsto y - w_0$ (welche **invertierbare** affine Abbildungen sind), können wir annehmen, dass $v_0 = 0$ und $w_0 = 0$. Unter dieser Annahme ist die Menge $\{v_1, \dots, v_k\}$ **linear unabhängig** (2.2.6), sodass wir $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^m$ als die Restriktion einer linearen Abbildung definieren können, die $f(v_i) = w_i$ für $i = 1, \dots, k$ erfüllt.

Eine einfache Berechnung zeigt, dass, wenn $f : \Delta \rightarrow \mathbb{R}^m$ die Restriktion einer affinen Abbildung ist, sie

$$f\left(\sum_{i=0}^k t_i v_i\right) = \sum_{i=0}^k t_i f(v_i)$$

für Punkte in Δ erfüllt. Dies zeigt, dass f eindeutig bestimmt ist durch die Abbildung der Knoten von Δ [M L11b]. \square

Definition 2.5.3.10 (Konstruktion singulärer Homologie) Sei X ein topologischer Raum. Ein singuläres q -Simplex in X ist eine stetige Abbildung

$$\gamma_q : \Delta_q \rightarrow X.$$

Die Abbildung γ_q muss nicht injektiv sein. Sei G wieder eine **abelsche** Gruppe, wie in Abschnitt 2.5. Anstatt der Kettengruppen $C_q(X, G)$ in der simplizialen Homologie betrachten wir nun die Gruppen $S_q(X, G)$ der singulären **q-Ketten** in X , bestehend aus formalen linearen Kombinationen

$$s_q = \sum_{i=1}^m g_i \gamma_{q_i} \quad (2.5.8)$$

von endlich vielen singulären q -**Simplizes** mit Koeffizienten $g_i \in G$. Dabei nennen wir $S(X, G) = \bigoplus_q S_q(X, G)$ auch den **singulären Kettenkomplex** von X .

Definition 2.5.3.11 Der **Randoperator** für eine singuläre Homologie definiert durch

$$\begin{aligned}\partial &= \partial_q : S_q(X) \rightarrow S_{q-1}(X) \\ \partial s_q &= \sum_{i=0}^q (-1)^i s_q \circ \delta_i \\ &\text{für } q \geq 1 (\partial_q := 0 \text{ für } q \leq 0) .\end{aligned}$$

Lemma 2.5.3.12 Wie bei der simplizialen Homologie (Simplizialkomplex) haben wir

$$\partial_q \circ \partial_{q+1} = 0 . \quad (2.5.9)$$

Definition 2.5.3.13 Die q -te (singuläre) Homologiegruppe des topologischen Raums X mit Koeffizienten in G ist

$$H_q(X, G) := \frac{\ker \partial_q}{\operatorname{im} \partial_{q+1}} . \quad (2.5.10)$$

Bemerkung 2.5.3.14 Der wichtige Punkt hier ist, dass dies mit stetigen Abbildungen kompatibel ist, das heißt, funktoriell in der Terminologie von Abschnitt 2.5.1. Tatsächlich induziert eine stetige Abbildung $f : X \rightarrow Y$ zwischen topologischen Räumen Homomorphismen $f_* : S_q(X, G) \rightarrow S_q(Y, G)$ zwischen den singulären Kettengruppen, weil das kontinuierliche Bild einer singulären q -Kette wieder eine singuläre q -Kette ist. Dies folgt aus der leicht überprüfbaren Beziehung

$$f_* \circ \partial = \partial \circ f_* . \quad (2.5.11)$$

(Zur Vereinfachung der Notation lassen wir den Dimensionsindex q in (2.5.11) weg; mit diesem Index würde die Formel $f_{q,*} \circ \partial_{q+1} = \partial_{q+1} \circ f_{q+1,*}$ lauten.)

Definition 2.5.3.15 Eine Abbildung $f_* : S(X, G) \rightarrow S(Y, G)$, die (2.5.11) erfüllt, wird als **Kettenabbildung** bezeichnet.

Satz 2.5.3.16 Eine stetige Abbildung $f : X \rightarrow Y$ zwischen topologischen Räumen induziert Homomorphismen

$$f_* := H_q(f, G) : H_q(X, G) \rightarrow H_q(Y, G) . \quad (2.5.12)$$

Beweis. Gleichung (2.5.11) impliziert, dass Zyklen auf Zyklen abgebildet werden, das heißt, wenn $\partial \sigma = 0$, dann $\partial f_*(\sigma) = f_* \partial(\sigma) = 0$, und Ränder werden auf Ränder abgebildet, da $f_*(\partial \sigma) = \partial(f_* \sigma)$. \square

Korollar 2.5.3.17 Homöomorphe topologische Räume haben dieselben Bettizahlen und Euler-Charakteristiken (2.5.9).

Definition 2.5.3.18 Die Kettenabbildungen f_* und g_* , die durch (stetige) Abbildungen $f, g : X \rightarrow Y$ zwischen topologischen Räumen induziert werden, sind kettenhomotop, wenn es Homomorphismen $P_q : S_q(X) \rightarrow S_{q+1}(Y)$ gibt mit

$$g_* - f_* = \partial P + P \partial$$

(wobei der Index q wieder weggelassen wird). Ein solches P wird dann als Kettenhomotopie zwischen f_* und g_* bezeichnet.

Lemma 2.5.3.19 Kettenhomotope Kettenabbildungen führt zu dieselben Homomorphismen $H_q(X) \rightarrow H_q(Y)$.

Beweis. Wenn $\partial\gamma = 0$, dann ist $g_*(\gamma) - f_*(\gamma) = \partial P(\gamma)$ ein Rand, und daher liefern $g_*(\gamma)$ und $f_*(\gamma)$ dieselbe Homologiekategorie. \square

Satz 2.5.3.20 Wenn $f, g : X \rightarrow Y$ **homotop** (Abbildung 2.9) sind, dann sind f_* und g_* kettenhomotop und bilden daher dieselben Homomorphismen $f_*, g_* : H_q(X, G) \rightarrow H_q(Y, G)$.

Beweis. Um Lemma 2.5.3.19 anzuwenden, müssen wir eine Kettenhomotopie konstruieren. Für das q -Simplex Δ_q mit den Knoten v_0, v_1, \dots, v_q (mit einer Änderung der Notation im Vergleich zu (2.5.6), aber wir können die beiden durch $v_0 = 0$ und $v_j = e_j$ als den j -ten Einheitsvektor für $j = 1, \dots, q$ in Einklang bringen), betrachten wir $\Delta_q \times I$ mit den Knoten

$$u_i = v_i \times \{0\}, \quad w_i = v_i \times \{1\}.$$

Wir nehmen dann Θ^i das $(q+1)$ -Simplex an, das die konvexe Hülle von $u_0, \dots, u_i, w_i, \dots, w_q$ ist. Die $\Theta^i, i = 0, \dots, q$, bilden eine Zerlegung von $\Delta_q \times I$. Sei $F : X \times I \rightarrow Y$ eine Homotopie zwischen f und g . Sei $\gamma = \gamma_q : \Delta_q \rightarrow X$ ein singuläres Simplex. Wir definieren den Prisma-Operator

$$P : S_q(X) \rightarrow S_{q+1}(Y)$$

$$\gamma \mapsto \sum_i (-1)^i F \circ (\gamma \times \text{id}) \Theta^i.$$

Um den Satz zu beweisen, werden wir zeigen

$$\partial P = g_* - f_* - P\partial. \quad (2.5.13)$$

Diese Beziehung spiegelt die Zerlegung des Randes von $\Delta_q \times I$ in das obere $\Delta_q \times \{1\}$, das untere

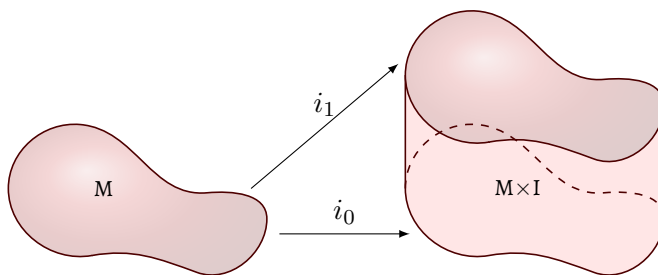


Abbildung 2.9: Eine **homotopische** Abbildung.

$\Delta_q \times \{0\}$ und den vertikalen Rand $\partial\Delta_q \times I$ wider. Wir haben

$$\begin{aligned} \partial P(\gamma) = \sum_{\nu \leq i} (-1)^i (-1)^\nu F \circ (\gamma \times \text{id})[u_0, \dots, \hat{u}_\nu, \dots, u_i, w_i, \dots, w_q] \\ + \sum_{\nu \geq i} (-1)^i (-1)^{\nu+1} F \circ (\gamma \times \text{id})[u_0, \dots, u_i, w_i, \dots, \hat{w}_\nu, \dots, w_q]. \end{aligned}$$

Die Terme mit $\nu = 1$ heben sich auf, außer für $i = 0$, wo wir $g_*(\gamma)$ erhalten, und $i = q$, wo wir $-f_*(\gamma)$ erhalten. Andererseits haben wir

$$\begin{aligned} P\partial(\gamma) = \sum_{\nu < i} (-1)^i (-1)^\nu F \circ (\gamma \times \text{id})[u_0, \dots, u_i, w_i, \dots, \hat{w}_\nu, \dots, w_q] \\ + \sum_{\nu > i} (-1)^{i-1} (-1)^\nu F \circ (\gamma \times \text{id})[u_0, \dots, \hat{u}_\nu, \dots, u_i, w_i, \dots, w_q], \end{aligned}$$

und dies ist das Negative der Terme mit $\nu = i$ in der Formel für $\partial P(\gamma)$. Wir haben somit (2.5.13) verifiziert und daher eine Kettenhomotopie konstruiert. \square

Korollar 2.5.3.21 Homotopie-äquivalente topologische Räume haben dieselben Bettizahlen und Euler-Charakteristiken (2.5.9) [JJ23].

2.5.4 Euler-Charakteristik

Wenn wir als Koeffizientengruppe G der Körper \mathbb{R} nehmen, werden die Kettengruppen $C_q(\Sigma, \mathbb{R})$ und daher auch die Homologiegruppen $H_q(\Sigma, \mathbb{R})$ zu Vektorräumen über \mathbb{R} , und wir können über ihre Dimensionen sprechen. Natürlich könnten wir auch jeder andere Körper nehmen. \mathbb{Z}_2 ist besonders nützlich.

Definition 2.5.4.1 Sei Σ ein Simplicialkomplex, und sei α_q die Anzahl seiner q -Simplizes oder äquivalent die Dimension des Vektorraums $C_q(\Sigma, \mathbb{R})$. Die Euler-Charakteristik von Σ ist

$$\chi(\Sigma) := \sum_q (-1)^q \alpha_q. \quad (2.5.14)$$

Satz 2.5.4.2

$$\chi(\Sigma) = \sum_q (-1)^q b_q(\Sigma). \quad (2.5.15)$$

Bemerkung 2.5.4.3 Nach dem Satz kann die Euler-Charakteristik, definiert als die alternierende Summe der Anzahl der q -Simplizes, äquivalent als die alternierende Summe der Bettizahlen b_q (2.5.9), d.h. der Ränge der Homologiegruppen, berechnet werden. Letztere Zahlen sind typischerweise viel kleiner als die ersteren. Somit kodiert die Euler-Charakteristik **Kürzungen** zwischen Simplizes benachbarter Dimensionen.

Lemma 2.5.4.4 Sei

$$0 \longrightarrow \cdots \longrightarrow A_{n+1} \xrightarrow{\ell_{n+1}} A_n \xrightarrow{\ell_n} A_{n-1} \longrightarrow \cdots \longrightarrow 0$$

eine Sequenz von linearen Abbildungen zwischen Vektorräumen. Dann gilt

$$\sum_n (-1)^n \dim A_n = \sum_n (-1)^n \lambda_n, \quad (2.5.16)$$

wobei

$$\lambda_n = \dim \ker \ell_n - \dim \operatorname{im} \ell_{n+1}. \quad (2.5.17)$$

Beweis. Wenn $\ell : V \rightarrow W$ eine lineare Abbildung zwischen Vektorräumen ist, dann gilt

$$\dim V = \dim \ker \ell + \dim \operatorname{im} \ell$$

Angewendet auf die Sequenz (2.5.4.4) ergibt sich

$$\begin{aligned} \sum_n (-1)^n \dim A_n &= \sum_n (-1)^n (\dim \ker \ell_n + \dim \operatorname{im} \ell_n) \\ &= \sum_n (-1)^n (\dim \operatorname{im} \ell_{n+1} + \lambda_n + \dim \operatorname{im} \ell_n) = \sum_n (-1)^n \lambda_n, \end{aligned} \quad (2.5.18)$$

da die Terme $\dim \operatorname{im} \ell_n$ zweimal mit entgegengesetzten Vorzeichen in der alternierenden Summe erscheinen und sich daher aufheben. \square

Beweis 2.5.4.2. Das Lemma 2.5.4.4 führt direkt zum Beweis vom Satz 2.5.4.2. Wir schreiben einfach C_q statt $C_q(\Sigma, \mathbb{R})$ und ebenso für H_q und betrachten die Sequenz

$$0 \longrightarrow \cdots \longrightarrow C_{q+1} \xrightarrow{\partial_{q+1}} C_q \xrightarrow{\partial_q} C_{q-1} \longrightarrow \cdots \longrightarrow 0 \quad (2.5.19)$$

von linearen Abbildungen zwischen Vektorräumen, wobei das linke 0 für das triviale C_s für $s = \dim \Sigma + 1$ steht und das rechte 0 für das triviale Bild von ∂_0 . Diese Sequenz hat die Form (2.7.3). Unter Verwendung der Beziehung $\dim V/W = \dim V - \dim W$ für Vektorräume V, W und der Definition $b_q = \dim(\ker \partial_q / \operatorname{im} \partial_{q+1})$ erhalten wir aus (2.5.18)

$$\chi(\Sigma) = \sum_q (-1)^q \alpha_q = \sum_q (-1)^q b_q.$$

Damit führen die entscheidende Eigenschaft $\partial_q \circ \partial_{q+1} = 0$ und die Definition von b_q hier zusammen zu der Gleichheit $\dim \ker \partial_q = \dim \operatorname{im} \partial_{q+1} + b_q$ [JJ23a]. \square

Lemma 2.5.4.5 Sei Δ ein Unterkomplex des Hyperkomplexes Σ (2.5.10). Wir haben wohldefinierte Abbildungen

$$\begin{aligned} i_* : H(\Sigma) &\rightarrow H(\Sigma, \Delta) \\ [c] &\mapsto [c](\Delta), \end{aligned} \quad (2.5.20)$$

und

$$\begin{aligned} \partial_* : H(\Sigma, \Delta) &\rightarrow H(\Delta) \\ [c]_{(\Sigma, \Delta)} &\mapsto [\partial c]_{\Delta}. \end{aligned} \quad (2.5.21)$$

wobei i_* einfach durch die **Inklusion** $\Delta \hookrightarrow \Sigma$ induziert wird. Eine Homologieklass in Δ wird dann zu einer Homologieklass in Σ . Dies funktioniert hier noch, weil die Randoperatoren in Δ und Σ identisch sind. Da ein Rand in Δ auch ein relativer Rand ist, ist j_* wohldefiniert. Wenn c ein relativer Zyklus ist, dann ist $\partial c \subset \Delta$ und da $\partial \partial c = 0$, ist es ein Zyklus in Σ .

Satz 2.5.4.6 Die Homologiesequenz des Paares (Σ, Δ) ,

$$\dots \xrightarrow{j_*} H(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} H(\Delta) \xrightarrow{i_*} H(\Sigma) \xrightarrow{j_*} H(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} \dots$$

ist exakt (2.5.1.4). Beim Simplezialkomplex kann das Graduieren q eingefügt werden um folgendes zu erhalten.

Korollar 2.5.4.7 Sei Δ ein Unterkomplex des Simplezialkomplexen Σ . Dann haben wir die exakte Homologiesequenz

$$\dots \xrightarrow{j_*} H_{q+1}(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} H_q(\Delta) \xrightarrow{i_*} H_q(\Sigma) \xrightarrow{j_*} H_q(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} \dots$$

Satz 2.5.4.8 Sei $\Lambda \subset \Delta \subset \Sigma$ Simplezialkomplexen. Ferner seien $i : (\Delta, \Lambda) \rightarrow (\Sigma, \Lambda)$ und $j : (\Sigma, \Lambda) \rightarrow (\Sigma, \Delta)$. Dann ist die Homologiesequenz

$$\begin{aligned} \dots \xrightarrow{j_*} H_{q+1}(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} H_q(\Delta, \Lambda) \xrightarrow{i_*} \\ H_q(\Sigma, \Lambda) \xrightarrow{j_*} H_q(\Sigma, \Delta) \xrightarrow{\partial_*} \dots \longrightarrow 0 \end{aligned} \quad (2.5.22)$$

exakt.

Lemma 2.5.4.9 Sei

$$\dots \xrightarrow{\ell_4} A_3 \xrightarrow{\ell_3} A_2 \xrightarrow{\ell_2} A_1 \xrightarrow{\ell_1} 0$$

eine Sequenz von linearen Abbildungen zwischen Vektorräumen, die exakt ist, d.h.

$$\dim \operatorname{im} \ell_j = \dim \operatorname{ker} \ell_{j-1} \quad \text{für alle } j. \quad (2.5.23)$$

Dann gilt für alle k

$$\dim A_1 - \dim A_2 + \dim A_3 - \dots - (-1)^k \dim A_k + (-1)^k \dim \operatorname{im} \ell_{k+1} = 0.$$

Beweis. Wie im Beweis von Lemma 2.5.4.4,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^k (-1)^n \dim A_n &= \sum_{n=1}^k (-1)^n (\dim \operatorname{ker} \ell_n + \dim \operatorname{im} \ell_n) \\ &= \sum_{n=1}^k (-1)^n (\dim \operatorname{ker} \ell_n + \dim \operatorname{ker} \ell_{n-1}) \quad \text{nach (2.5.23)} \\ &= (-1)^k \dim \operatorname{ker} \ell_k \\ &= (-1)^k \dim \operatorname{im} \ell_{k+1} \quad \text{erneut nach (2.5.23).} \end{aligned}$$

□

Definition 2.5.4.10 Das **Poincaré-Polynom** des Paares $\Delta \subset \Sigma$ von Simplicialkomplexen ist definiert als

$$P(t, \Sigma, \Delta) := \sum_q b_q(\Sigma, \Delta) t^q \quad \text{für } t \in \mathbb{R}. \quad (2.5.24)$$

Wir definieren durch (2.5.22) auch:

$$Q_k(\Sigma, \Delta, \Lambda) := \sum_q \dim(\mathbf{im} \delta_{q+1,*}) t^q. \quad (2.5.25)$$

Lemma 2.5.4.11 Für simpliciale Komplexe $\Lambda \subset \Delta \subset \Sigma$ gilt:

$$P(t, \Sigma, \Delta) - P(t, \Sigma, \Lambda) + P(t, \Delta, \Lambda) = (1 - t) Q_k(\Sigma, \Delta, \Lambda). \quad (2.5.26)$$

Beweis. Aus dem Lemma 2.5.4.9 ergibt sich:

$$\sum_{q=0}^k (-1)^q (b_q(\Sigma, \Delta) - b_q(\Sigma, \Lambda) + b_q(\Delta, \Lambda)) - (-1)^k \dim(\mathbf{im} \delta_{k+1,*}) = 0. \quad (2.5.27)$$

Daraus folgt:

$$\begin{aligned} (-1)^{k-1} \dim(\mathbf{im} \delta_{k,*}) &= (-1)^k \dim(\mathbf{im} \delta_{k+1,*}) \\ &\quad - (-1)^k (b_k(\Sigma, \Delta) - b_k(\Sigma, \Lambda) + b_k(\Delta, \Lambda)). \end{aligned} \quad (2.5.28)$$

Wir multiplizieren (2.5.28) mit $(-1)^k t^k$ und summieren die, um (2.5.26) zu erhalten. □

Definition 2.5.4.12 Die **relative Euler-Zahl** des Paares $\Delta \subset \Sigma$ von simplicialen Komplexen ist

$$\chi(\Delta, \Sigma) := \sum_q (-1)^q b_q(\Delta, \Sigma).$$

Korollar 2.5.4.13 Die relative Euler-Zahl des Paares $\Delta \subset \Sigma$ von Simplicialkomplexen ist gegeben durch

$$\chi(\Delta, \Sigma) = \chi(\Delta) - \chi(\Sigma). \quad (2.5.29)$$

Beweis: Wir setzen $\Sigma = \emptyset$ und $t = -1$ in (2.5.26).

Definition 2.5.4.14 Eine Familie $\Sigma_n \subset \dots \subset \Sigma_1 \subset \Sigma_0$ von Simplicialkomplexen wird als **Filtration** von Σ_0 bezeichnet

Satz 2.5.4.15 Sei $\Sigma_n \subset \dots \subset \Sigma_1 \subset \Sigma_0$ eine Filtration des Simplicialkomplexes Σ_0 . Dann gilt:

$$\sum_{j=1}^n P(t, \Sigma_{j-1}, \Sigma_j) = P(t, \Sigma_0, \Sigma_n) + (1 + t) Q(t), \quad (2.5.30)$$

wobei $Q(t) = \sum_{j=1}^{n-1} Q(t, \Sigma_{j-1}, \Sigma_j, \Sigma_n)$.

Beweis. Wir wenden (2.5.26) auf $\Sigma_n \subset \Sigma_j \subset \Sigma_{j-1}$ an und summieren die über j . \square

Korollar 2.5.4.16 Für eine Filtration $\Sigma_n \subset \dots \subset \Sigma_1 \subset \Sigma_0$ des simplizialen Komplexes Σ_0 gilt:

$$\chi(\Sigma_0, \Sigma_n) = \sum_{j=1}^n \chi(\Sigma_{j-1}, \Sigma_j). \quad (2.5.31)$$

Beweis. Dis folgt direkt mit dem Einsetzen $t = -1$ in (2.5.30). \square

Bemerkung 2.5.4.17 Mit der Gleichung (2.5.27) reduziert sich (2.5.31) auf die triviale Identität

$$\chi(\Sigma_0) = \sum_{j=1}^n (\chi(\Sigma_{j-1}) - \chi(\Sigma_j)) + \chi(\Sigma_n),$$

was den Titel dieses Abschnitts erklärt. Obwohl dies trivial ist, verkörpert (2.5.26) eine wichtige Tatsache, nämlich die Additivität der Euler-Zahl. Folglich besagt (2.5.31), dass die Euler-Zahl eines simplizialen Komplexes aus den Euler-Zahlen seiner Teile aufgebaut werden kann. Das Prinzip dieser Konstruktion lässt sich wie folgt extrahieren: Die **Betti-Zahl** $b_q(\Sigma_0, \Sigma_n)$ wird als Summe $\sum_{j=1}^n b_q(\Sigma_{j-1}, \Sigma_j)$ über die Zwischenkomplexe in der Filtration ausgedrückt, bis zu einem Restterm. Diese Restterme heben sich auf, wenn wir die alternierende Summe bezüglich q nehmen. Wir können $\Sigma_n = \emptyset$ setzen. In diesem Fall gilt $b_q(\Sigma_0, \Sigma_n) = b_q(\Sigma_0)$. Diese Relationen zeigen also, wie die Topologie von Σ_0 aus Σ_{n-1} und der relativen Topologie der Zwischenpaare (Σ_{j-1}, Σ_j) für $j = 1, \dots, n-1$ aufgebaut ist. Wie zu Beginn erwähnt, haben alle in diesem Abschnitt präsentierten Ergebnisse Analoga in der singulären Homologie von topologischen Räumen X und Unterräumen A [JJ23h].

2.6 Kohomologie

Die **Kohomologie** ist **dual** zur **Homologie** (2.5) und basiert auf **linearen** Funktionalen auf Kettengruppen. Für unser Ziel bzgl. Laplace-Typ-Operatoren ist diese bequemer. Sei **Monoids** die Kategorie der Monoid, und sei M ein Monoid. Tatsächlich ist es nicht sehr nützlich, ein allgemeines Monoid zu betrachten, das keine Gruppe ist, da es möglicherweise nicht viele Homomorphismen von einer Gruppe in ein solches Monoid gibt, da die Inversen der Elemente möglicherweise keine Bilder finden. Zum Beispiel betrachte die Gruppe \mathbb{Z} und das Monoid \mathbb{N}_0 . In diesem Fall gibt es nur den trivialen Homomorphismus $\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{N}_0$, der alles auf 0 abbildet. Kurz gesagt, in jedem Fall nehmen wir M als der Körper \mathbb{R} , aber formal können wir zu diesem Zeitpunkt mit jedem Monoid M beginnen. Dann haben wir den Hom-Funktor:

$$\begin{aligned} \mathbf{Monoids}^{\text{op}} &\rightarrow \mathbf{Sets} \\ A &\mapsto \text{Hom}(A, M) \end{aligned} \quad (2.6.1)$$

der jedem Monoid A die Menge der Monoid-Homeomorphismen von A nach M zuordnet und der jedem Monoid-Homomorphismus $\phi : A_1 \rightarrow A_2$, also jedem Morphismus $\phi^* : A_2 \rightarrow A_1$ in **Monoids**^{op}, abbildet auf:

$$\begin{aligned}\phi^* : \text{Hom}(A_2, M) &\rightarrow \text{Hom}(A_1, M) \\ f &\mapsto f \circ \phi.\end{aligned}\tag{2.6.2}$$

Wir bemerken, dass die Richtung der Pfeile (also Morphismen) umgekehrt wird, und aus diesem Grund wird der Hom-Funktor **kontravariant** genannt. Sei Σ ein Hyperkomplex mit Ketten-g-Monoid $C(\Sigma, M)$ und Randoperator ∂ . Dann haben wir das g-Monoid $\text{Hom}(C(\Sigma, M), M)$ der Ketten mit Werten in M und den Korandoperator:

$$\begin{aligned}\delta : \text{Hom}(C(\Sigma, M_\Sigma), M) &\rightarrow \text{Hom}(C(\Sigma, M_\Sigma), M), \\ f &\mapsto f \circ \partial, \\ \text{d.h.} \quad \delta(f)(\sum g_i \sigma^i) &= f(\sum g_i \partial \sigma^i)\end{aligned}\tag{2.6.3}$$

Lemma 2.6.1 Sei M ein kommutatives g-Monoid. Dann gilt

$$\delta \circ \delta = 0$$

Beweis. Dies folgt aus der Tatsache, dass der Randoperator ∂ die Eigenschaft $\partial \circ \partial = 0$ erfüllt. \square

Bemerkung 2.6.2 Wenn Σ ein Simplicialkomplex ist und Koeffizienten in einer abelschen Gruppe genommen werden, können wir die Gruppe der q -**Koketten**

$$C^q(\Sigma, M) := \text{Hom}(C_q(\Sigma), M)\tag{2.6.4}$$

definieren. Da die $C_q(\Sigma)$ in diesem Fall abelsche Gruppen sind, ist es natürlich anzunehmen, dass das Monoid M selbst eine abelsche Gruppe G ist. Andernfalls existieren möglicherweise nicht viele Homomorphismen von $C_q(\Sigma)$ nach M , da die Inversen der Elemente von $C_q(\Sigma)$ möglicherweise kein Bild finden. In jedem Fall erhalten wir die Kobord-Operatoren

$$\delta^q : C^q(\Sigma, M) \rightarrow C^{q+1}(\Sigma, M)$$

$$f \mapsto f \circ \partial^q.$$

Explizit gilt für

$$(\delta^q f)([v_0, \dots, v_{q+1}]) = \sum_{j=0}^{q+1} (-1)^j f([v_0, \dots, \hat{v}_j, \dots, v_{q+1}]).\tag{2.6.5}$$

Definition 2.6.3 Die q -te Kohomologiegruppe des simplizialen Komplexes Σ mit Koeffizienten in

der abelschen Gruppe G ist

$$H^q(\Sigma, G) := \frac{\ker \delta^q}{\operatorname{im} \delta^{q-1}}$$

Bemerkung 2.6.4 Die relativen Kohomologiegruppen $H^q(\Sigma, \Delta; G)$ von Paaren (Σ, Δ) von Simplicialkomplexen können auf die gleiche Weise definiert werden [JJ23c].

Satz 2.6.5 (Minimum-Maximum-Prinzip) Sei H ein N -dimensionaler Vektorraum mit einem positiv definiten Skalarprodukt (2.2.6) (\cdot, \cdot) . Sei \mathcal{H}_k die Menge aller k -dimensionalen Unterräume von H . Sei $A : H \rightarrow H$ ein selbstadjungierter linearer Operator. Dann können die Eigenwerte $\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N$ von A wie folgt bestimmt werden:

$$\lambda_k = \min_{H_k \in \mathcal{H}_k} \max_{\substack{g \in H_k \\ g \neq 0}} \frac{(Ag, g)}{(g, g)} = \max_{H_{N-k+1} \in \mathcal{H}_{N-k+1}} \left(\min_{\substack{g \in H_{N-k+1} \\ g \neq 0}} \frac{(Ag, g)}{(g, g)} \right). \quad (2.6.6)$$

Bemerkung 2.6.6 Insbesondere gilt:

$$\lambda_1 = \min_{g \in H} \frac{(Ag, g)}{(g, g)}, \quad \lambda_N = \max_{g \in H} \frac{(Ag, g)}{(g, g)}. \quad (2.6.7)$$

Dabei wird der Ausdruck $\frac{(Ag, g)}{(g, g)}$ als **Rayleigh-Quotient** von g bezüglich des Operators A bezeichnet [JJ23d].

2.6.1 Mannigfaltigkeiten

Ein **Mannigfaltigkeit** ist **lokal** in Bezug auf **topologische** Räume (siehe auch den Abschnitt 2.5.2 auf den kartesischen Raum modelliert. Wenn diese lokalen Modelle geeignete Kompatibilitätsbedingungen erfüllen, können weitere Strukturen wie Differenzierbarkeit herbeigeführt werden. Mannigfaltigkeiten zeigen daher überall das gleiche lokale qualitative Verhalten, können jedoch eine nicht-triviale globale Topologie besitzen, beispielsweise **nicht-verschwindende** Bettizahlen (2.5.9) in verschiedenen Dimensionen.

Definition 2.6.1.1 (Mannigfaltigkeit) Eine Mannigfaltigkeit X der Dimension n ist ein **zusammenhängender** parakompakter **Hausdorff**-Raum, für den jeder Punkt eine Nachbarschaft U mit einem Homöomorphismus, genannt (Koordinaten-) Karte,

$$x : U \rightarrow \Omega$$

besitzt, wobei $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ eine offene Menge ist. Wir können insbesondere das sogenannte **Atlas** also eine Familie $\{U_i, x_i\}$ von Karten finden, die X überdecken. Die Karte $x = (x^1, \dots, x^n)$ liefert die Koordinaten $x(p) = (x_1(p), \dots, x_n(p)) \in \mathbb{R}^n$ für $p \in U \subset X$.

Bemerkung 2.6.1.2 Wenn wir die gesprochene Karte festlegen, können wir p mit seinen Koordinatenwerten identifizieren. Unterschiedliche Karten ergeben jedoch unterschiedliche Koordinatenwerte und die Geometrie zielt als eine konzeptionelle Aufgabedarauf ab, Eigenschaften zu

identifizieren, die unabhängig von der Wahl der Koordinatenkarten sind, oder anders formuliert, invariant unter Koordinatentransformationen sind.

Definition 2.6.1.3 Sei \mathcal{C} eine Struktur auf \mathbb{R}^n , wie eine Menge von Homöomorphismen $c: \Omega_1 \rightarrow \Omega_2$ offener Teilmengen von \mathbb{R}^n . \mathcal{C} könnte beispielsweise **Lipschitz**-Homöomorphismen, Diffeomorphismen einer bestimmten Differenzierbarkeitsklasse \mathcal{C}^k für $k \in \{1, 2, \dots, \infty\}$ oder bijektive affine Abbildungen umfassen. Ein Atlas $\{U_i, x_i\}$ importiert damit auf der Mannigfaltigkeit X diese Struktur, wenn alle **Kartenübergänge** (auch oft **Kartenwechsel** genannt)

$$x_j \circ x_i^{-1} : x_i(U_i \cap U_j) \longrightarrow x_j(U_i \cap U_j) \quad (2.6.8)$$

in \mathcal{C} liegen.

Bemerkung 2.6.1.4 Die Bedingung (2.6.8) kann überprüft werden, da sowohl $x_i(U_i \cap U_j)$ als auch $x_j(U_i \cap U_j)$ offene Teilmengen von \mathbb{R}^n sind. Sie gilt in beide Richtungen, da, wenn $x_j \circ x_i^{-1}$ ein Kartenübergang ist, auch seine Umkehr $x_i \circ x_j^{-1}$ ein Kartenübergang ist.

Definition 2.6.1.5 Eine Teilmenge B der n -dimensionalen Mannigfaltigkeit N heißt **b**-dimensionale **berandete Untermannigfaltigkeit** von N , wenn es zu jedem $p \in B$ eine Karte (ψ, V) von N um p gibt, die eine **Untermannigfaltigkeitskarte** von N um p für B ist, mit

$$\psi(V \cap B) = \psi(V) \cap (\bar{\mathbb{H}}^b \times \{0\}) \subset \mathbb{R}^n.$$

Hierbei heißt p **Berandungspunkt** von B (**Abbildung 2.10**), wenn $\psi(p)$ in $\partial\mathbb{H}^b := \partial\mathbb{H}^b \times \{0\}$ liegt.

Definition 2.6.1.6 (Tangentialraum) Es seien B eine **berandete** Untermannigfaltigkeit von N und $P \in \partial B$. Außerdem sei (φ, U) eine Karte von B um P . Dann wird der **Tangentialraum** $T_P B$ von B im Punkt P durch

$$T_P B := T_\varphi(p)(i_B \circ \varphi^{-1})(T_\varphi(P)R^b)$$

mit $b := \dim(B)$ definiert, wobei $i_B := B \hookrightarrow N$ die natürliche Einbettung $P \mapsto P$ von B in N , eine glatte Abbildung ist [AE08d].

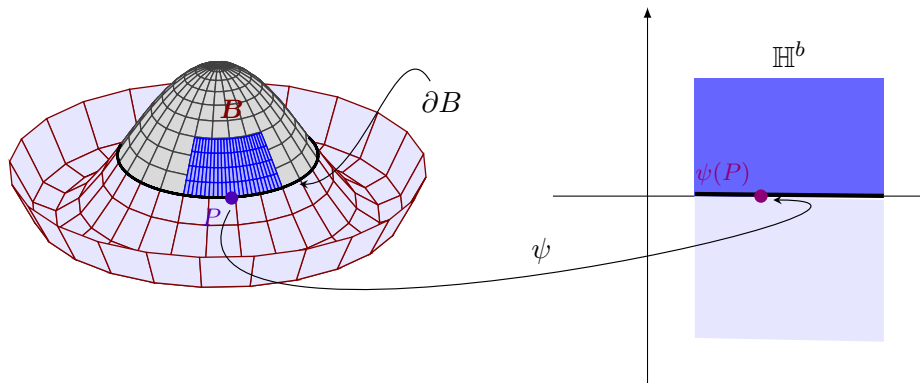


Abbildung 2.10: Eine **berandete** Hyperfläche mit dem **Berandungspunkt** P .

Definition 2.6.1.7 (Differenzierbarkeit) Der Atlas $\{U_i, x_i\}$ auf der Mannigfaltigkeit X wird als **differenzierbar** (von Klasse C^∞ es sei denn, anders angegeben) bezeichnet, wenn die Kartenübergänge alle unendlich oft differenzierbar sind (oder, wenn wir eine differenzierbare Mannigfaltigkeit der Klasse C^k betrachten wollen, müssen sie alle k mal stetig differenzierbar sein). Anders gesagt, können wir die größte Familie solcher Karten auf X betrachten und einen solchen maximal differenzierbaren Atlas als differenzierbare Struktur bezeichnen.

Definition 2.6.1.8 (Der Hodgesche Sternoperator) Es seien $(V, (\cdot | \cdot), \mathcal{O}_r)$ ein orientierter Innenproduktraum, $m := \dim(V)$ und ω das Volumenelement von V . Ferner sei $\{e_1, \dots, e_m\}$ eine **ONB** (2.2.6) von V , und $\{\varepsilon^1, \dots, \varepsilon^m\}$ sei die zugehörige Dualbasis. Wir definieren nun auf $\bigwedge^r V^*$ ein Skalarprodukt (2.2.6) $(\cdot | \cdot)_r$ wie folgt:

Für $r = 0$ sei

$$(\alpha | \beta)_0 := \alpha\beta, \quad \alpha, \beta \in \bigwedge^0 V^* = \mathbb{R},$$

Für $1 \leq r \leq m$ seien

$$\alpha = \sum_{(j) \in \mathbb{J}_r} a_{(j)} \varepsilon^{(j)}, \quad \beta = \sum_{(j) \in \mathbb{J}_r} b_{(j)} \varepsilon^{(j)},$$

wobei mit dem $\mathbb{J}_r(n)$ die Menge aller rechtsseitig abgeschlossenen Intervalle in \mathbb{R}^n bezeichnet werden.

Bemerkung 2.6.1.9

- a) die Basis $\{\varepsilon^{(j)}; (j) \in \mathbb{J}_r\}$ ist eine **ONB** (2.2.6) von $(\bigwedge^r V^*, (\cdot | \cdot)_r)$ für $1 \leq r \leq m$.
- b) Für $\alpha^1, \dots, \alpha^r, \beta^1, \dots, \beta^r \in V^*$ gilt

$$(\alpha^1 \wedge \dots \wedge \alpha^r | \beta^1 \wedge \dots \wedge \beta^r)_r = \det \left[\left(\alpha^j | \beta^k \right)_* \right] \text{ [AE08c]}.$$

Definition 2.6.1.10 Für $x \in X$ ist der **Kotangentialraum** $T_x^* X = \{x\} \times (\mathbb{R}^m)^*$ der **Dualraum** des Tangentialraumes $T_x X = \{x\} \times \mathbb{R}^m$. Folglich sind die äußeren Produkte

$$\bigwedge^r T_x^* X = \{x\} \times \bigwedge^r (\mathbb{R}^m)^*, \quad r \in \mathbb{N},$$

in der **Graßmann-Algebra** also

$$\bigwedge T_x^* X = \{x\} \times \bigwedge (\mathbb{R}^m)^*,$$

von $T_x^* X$ wohldefiniert. Die Verallgemeinerung von Tangential- und Kotangentialbündeln führt uns zum Bündel der alternierenden r -Formen auf X , definiert durch

$$\bigwedge^r T^* X := \bigcup_{x \in X} \bigwedge^r T_x^* X = X \times \bigwedge^r (\mathbb{R}^m)^*,$$

und zum Graßmann**bündel** von X durch

$$\bigwedge T^* X := \bigcup_{x \in X} \bigwedge T_x^* X = X \times \bigwedge (\mathbb{R}^m)^*. \quad (2.6.9)$$

Definition 2.6.1.11 (Differentialform) Eine Abbildung

$$\alpha : X \rightarrow \bigwedge^r T^*X \quad \text{mit} \quad \alpha(x) \in \bigwedge^r T_x^*X, \quad x \in X,$$

d.h. ein **Schnitt**^{II} des Graßmannbündels (2.6.9), heißt Differentialform vom Grad r (kurz: **r -Form**) auf X . Jede r -Form auf X besitzt eine eindeutige Darstellung

$$\alpha(x) = (x, \alpha(x)), \quad x \in X,$$

mit dem **Hauptteil**

$$\alpha : X \rightarrow \bigwedge^r (\mathbb{R}^m)^*.$$

Definition 2.6.1.12 Es sei $k \in \mathbb{N} \cup \{\infty\}$. Die r -Form α gehört zur Klasse C^k (oder ist k -mal stetig differenzierbar bzw. glatt im Fall $k = \infty$), wenn dies für ihren Hauptteil gilt, d.h., wenn

$$\alpha \in C^k \left(X, \bigwedge^r (\mathbb{R}^m)^* \right).$$

Bemerkung 2.6.1.13 Die Addition

$$\Omega^r(X) \times \Omega^r(X) \rightarrow \Omega^r(X), \quad (\alpha, \beta) \mapsto \alpha + \beta$$

und das äußere Produkt

$$\wedge : \Omega^r(X) \times \Omega^s(X) \rightarrow \Omega^{r+s}(X), \quad (\alpha, \beta) \mapsto \alpha \wedge \beta$$

werden punktweise ausgeführt:

$$(\alpha + \beta)(x) := \alpha(x) + \beta(x), \quad (\alpha \wedge \beta)(x) := \alpha(x) \wedge \beta(x), \quad \forall x \in X.$$

Diese Abbildungen sind offensichtlich wohldefiniert [AE08a].

Bemerkung 2.6.1.14 Bei einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit kann über die Differenzierbarkeit einer Funktion $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ gesprochen werden, indem es überprüft wird, ob $f \circ x^{-1}$ auf jeder Karte unseres differenzierbaren Atlas differenzierbar ist. Die Bedingung (2.6.8) stellt sicher, dass dies unabhängig von der Wahl der Koordinatenkarte ist.

Eine differenzierbare Untermannigfaltigkeit ist eine Mannigfaltigkeit, die eindeutig in X eingebettet ist (also injiziert ist) und in jedem lokalen Koordinatensystem eine differenzierbare Untermannigfaltigkeit darstellt, wodurch sie selbst zu einer differenzierbaren Mannigfaltigkeit wird. Alle differenzierbaren Untermannigfaltigkeiten von \mathbb{R}^n sind daher ebenfalls differenzierbare Mannigfaltigkeiten.

Außerdem sprechen wir oft anstelle von Differenzierbarkeit oft von **Glattheit** und die Glattheit und der differenzierbare Klasse C^∞ werden gleich verstanden.

^{II} Ein Schnitt des Graßmannbündels bezeichnet in diesem Kontext eine Abbildung, die jedem Punkt der Mannigfaltigkeit X ein Element des Graßmannbündels zuordnet.

Definition 2.6.1.15 (De Rham-Komplex) Sei X eine **glatte** Mannigfaltigkeit und $\Omega^p(X)$ die Menge der p -Formen auf X . Der de Rham-Komplex $(\Omega^p(X), d^p)$ ist ein Kokettenkomplex, der wie folgt definiert ist:

- **p -Formen:** $\Omega^p(X)$ ist die Menge der glatten Differentialformen vom Grad p auf X .
- **Äußere Ableitung:** $d^p : \Omega^p(X) \rightarrow \Omega^{p+1}(X)$ ist ein linearer Operator (2.5.4.4), der jede p -Form auf eine $(p+1)$ -Form abbildet und die Eigenschaft $d^{p+1} \circ d^p = 0$ erfüllt (2.5.4).

Dies führt zu einer Sequenz

$$0 \rightarrow \Omega^0(X) \xrightarrow{d^0} \Omega^1(X) \xrightarrow{d^1} \Omega^2(X) \xrightarrow{d^2} \dots \xrightarrow{d^{n-1}} \Omega^n(X) \rightarrow 0,$$

die als **de Rham-Komplex** bezeichnet wird. Dieser Komplex ermöglicht die Untersuchung der topologischen Eigenschaften der Mannigfaltigkeit X mittels ihrer Differentialformen.

Bemerkung 2.6.1.16 Differenzierbare Mannigfaltigkeiten (2.6.1.7) sind von entscheidender Bedeutung, da sie glatte Strukturen beschreiben, auf die es als Rechnungsmittel anwendbar ist. Somit können wir, wenn wir eine differenzierbare Funktion $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ haben, deren partielle Ableitungen (2.2.1) in lokalen Koordinaten am Punkt p , der mit $x(p)$ identifiziert wird, in einer lokalen Karte x berechnen. Allerdings stoßen wir auf das Problem, wenn wir zu einer anderen Karte y wechseln und p mit $y(p)$ identifizieren, da dann die partiellen Ableitungen werden zu

$$\frac{\partial f(y)}{\partial y^j}, \quad j = 1, \dots, n.$$

Wir beachten dabei, dass wir auf die geaneue Notation, nämlich $f(p) = f \circ x^{-1}(x(p)) = f \circ y^{-1}(y(p))$ zur Vereinfachung verzichten haben.

Definition 2.6.1.17 (Tangentenvektor) Ein Tangentenvektor am Punkt p ist ein Objekt, das in lokalen Koordinaten $x(p)$ als

$$V(p) = v^i(x(p)) \frac{\partial}{\partial x^i}, \tag{2.6.10}$$

bezeichnet wird, wobei wir hier und im Folgenden die **Einstein'sche** Summationskonvention verwenden, grob gesagt, dass jeder Index, der zweimal in einem Produkt auftritt, einmal an einer unteren und einmal an einer oberen Position, summiert werden muss. Zum Beispiel,

$$v^i(x(p)) \frac{\partial}{\partial x^i} = \sum_{i=1}^n v^i(x(p)) \frac{\partial}{\partial x^i}.$$

Bemerkung 2.6.1.18 Unter einer Koordinatentransformation $y = y(x)$ haben wir die Kettenregel

$$\frac{\partial}{\partial x^i} = \frac{\partial y^j}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial y^j}$$

(erneut mit Summation über j), und somit wird (2.6.10) im V

$$(p) = v^i(x(p)) \frac{\partial y^j}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial y^j}, \quad (2.6.11)$$

transformiert, das heißt, in der Koordinatenkarte y sind die Koeffizienten von $V(p)$ nun

$$\tilde{v}^j(y(p)) = v^i(x(p)) \frac{\partial y^j}{\partial x^i}. \quad (2.6.12)$$

Der Raum der Tangentenvektoren am Punkt p , das heißt, der Objekte, die in lokalen Koordinaten als (2.6.10) somit darstellbar sind und die die Transformationsregel (2.6.12) erfüllen, wird als **Tangentenraum** $T_p X$ von X am Punkt p bezeichnet (siehe auch die Definition 2.6.1.6). Da Tangentenvektoren addiert und mit Skalaren multipliziert werden können, ist $T_p X$ dann ein Vektorraum der Dimension (2.5.9) n für jedes $p \in X$.

Definition 2.6.1.19 Der Dualraum des Tangentenraums $T_p X$ wird als **Kotangentenraum** $T_p^* X$ bezeichnet, und wir verwenden die Basisvektoren dx^i , $i = 1, \dots, n$, die

$$dx^i \left(\frac{\partial}{\partial x^j} \right) = \delta_j^i := \begin{cases} 1 & \text{falls } i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

(siehe auch Präliminare 2.2.2). Die Kotangentenvektoren müssen deshalb **dual** zu den Tangentenvektoren transformiert werden, das heißt,

$$dy^k = \frac{\partial y^k}{\partial x^j} dx^j, \quad (2.6.13)$$

sodass es gilt:

$$dy^k \left(\frac{\partial}{\partial y^\ell} \right) = \delta_\ell^k. \quad (2.6.14)$$

Für $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ kann damit auch sein Differential eingeführt werden,

$$df := \frac{\partial f}{\partial x^i} dx^i.$$

Definition 2.6.1.20 Ein Vektorfeld auf X ordnet jedem $p \in X$ in differenzierbarer Weise einen Tangentenvektor $V(p) \in T_p X$ zu (wiederum, konsistent überprüft in lokalen Koordinaten). Ebenso wird ein Kovektorfeld, auch 1-Form genannt, durch ein differenzierbares $\Omega(p) \in T_p^* X$ gegeben [JJ23g].

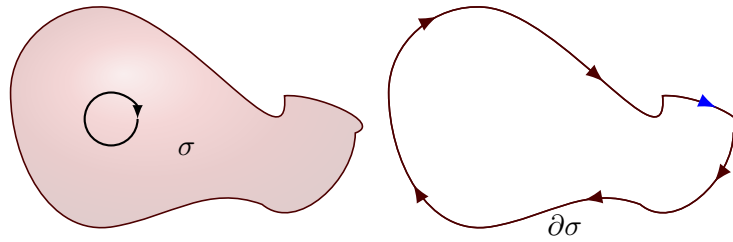


Abbildung 2.11: Eine **nicht**orientierbare Mannigfaltigkeit σ und ihr Rand.

2.6.2 Der Satz von Stokes

In diesem Abschnitt werden die Verknüpfung der Differential- und Integralrechnung auf Mannigfaltigkeiten im Kontext des allgemeinen Stokes'schen Satzes kurz präsentiert. Dieser Satz dient als eine höherdimensionale Erweiterung des **Fundamentalsatzes** der Differential- und Integralrechnung^{III} und findet weitreichende Anwendungen sowohl in der Mathematik als auch in der theoretischen Physik.

Definition 2.6.2.1 (Orientierungen) Sei V ein endlich-dimensionaler Vektorraum, dann ist eine Orientierung von V eine Äquivalenzklasse von geordneten Basen von V , wobei zwei geordnete Basen als äquivalent betrachtet werden, wenn die Transformationsmatrix, die eine Basis in die andere überführt, eine positive Determinante hat. Jeder Vektorraum hat genau zwei Orientierungen. Sobald eine Orientierung gewählt ist, sagt man, eine Basis sei positiv orientiert, wenn sie zur gewählten Orientierung gehört, und negativ orientiert, wenn nicht. Die Standardorientierung von \mathbb{R}^n ist diejenige, die durch die Standardbasis (e_1, \dots, e_n) bestimmt wird (2.5.3.6).

Bemerkung 2.6.2.2 Sei M eine **glatte** Mannigfaltigkeit ist, dann ist eine Orientierung für M eine Wahl einer Orientierung für jeden Tangentialraum (2.6.1.6), die in dem Sinne stetig ist, dass es in einer Nachbarschaft jedes Punktes einen (stetigen) lokalen Rahmen gibt, der die gegebene Orientierung an jedem Punkt der Nachbarschaft bestimmt. Im Fall der Existenz einer **Orientierung** für M wird M **orientierbar** genannt (Abbildung 2.11)

Definition 2.6.2.3 Eine **orientierte** Mannigfaltigkeit ist eine **glatte orientierbare** Mannigfaltigkeit zusammen mit einer **Wahl** einer Orientierung. Wenn M eine orientierte n -Mannigfaltigkeit ist, dann wird eine glatte Koordinatenkarte $(U, (x_i))$ als **orientierte** Karte bezeichnet, wenn der Koordinatenrahmen

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial x_n} \right)$$

an jedem Punkt positiv orientiert ist. Genau die gleichen Definitionen gelten für Mannigfaltigkeiten mit Rand.

Proposition 2.6.2.4 Sei M eine n -Mannigfaltigkeit mit oder ohne Rand. Jede nichtverschwindende n -Form (eine Differentialform (2.6.1.11), die nirgendwo null ist) $\omega \in \Omega^n(M)$ bestimmt eine eindeutige Orientierung von M , indem eine geordnete Basis (b_1, \dots, b_n) für $T_p M$ genau dann als positiv

^{III} Sei $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ eine differenzierbare Funktion auf dem (abgeschlossenen) Intervall $I := [a, b]$. Dann gilt

$$f(b) - f(a) = \int_I f'(x).$$

orientiert erklärt wird, wenn $\omega_p(b_1, \dots, b_n) > 0$. Umgekehrt gibt es, wenn M orientiert ist, eine glatte nichtverschwindende n -Form, die die Orientierung auf diese Weise bestimmt.

Bemerkung 2.6.2.5 Aufgrund der Proposition 2.6.2.4 wird eine nichtverschwindende n -Form auf einer glatten n -Mannigfaltigkeit als **Orientierungsform** bezeichnet. Falls die Mannigfaltigkeit M zusätzlich orientiert ist und ω die gegebene Orientierung bestimmt, ist ω positiv orientiert.

Proposition 2.6.2.6 Sei M eine orientierte glatte Mannigfaltigkeit mit Rand. Dann ist ∂M orientierbar, und sie hat eine kanonische Orientierung (genannt die induzierte Orientierung oder Stokes-Orientierung), die durch $\iota^*(N \lrcorner \omega)$ bestimmt wird, wobei $\iota : \partial M \hookrightarrow M$ die **Inklusion** (2.5.20) ist, N ein beliebiges nach außen gerichtetes Vektorfeld entlang ∂M ist, und ω eine beliebig positiv orientierte Orientierungsform für M ist [M L19].

Präliminarien 2.6.2.7

- **Volumenform:** Eine Volumenform auf Mannigfaltigkeit M ist eine nichtverschwindende m -Form, wobei m die Dimension von M ist.
- $\Omega^m(M)$: Raum der m -Formen auf M .
- **Glatte Funktionen:** $\varepsilon(U)$ -Modul repräsentiert den Raum der glatten (unendlich differenzierbar) Funktionen auf einer offenen Menge U in der Mannigfaltigkeit M .
- **Orientierbarkeit:** Ist M orientierbar, so ist $\dim(\Lambda^m T_p^* M) = 1$.
Beweis. Es seien α eine Volumenform auf M und $\beta \in \Omega^m(M)$. Da $\dim(\Lambda^m T_p^* M) = 1 \forall p \in M$, existiert eine glatte Funktion $f : M \rightarrow \mathbb{R}$ mit $\beta = f\alpha$. Wir müssen nun zeigen, dass f glatt ist. In lokalen Koordinaten gilt:

$$\alpha|_U = a dx^1 \wedge \dots \wedge dx^m, \quad \beta|_U = b dx^1 \wedge \dots \wedge dx^m,$$

wobei $a, b \in \varepsilon(U)$ und $a(p) \neq 0$ für $p \in U$. Mit dem Einsetzen $f := \frac{b}{a} \in \varepsilon(U)$ ergibt sich

$$\beta|_U = f\alpha|_U.$$

□

Satz 2.6.2.8 Eine Mannigfaltigkeit der Dimension $m \geq 2$ ist genau dann orientierbar, wenn sie einen orientierten Atlas (2.6.1.1) besitzt.

Bemerkung 2.6.2.9 Angenommen, die Mannigfaltigkeit M orientierbar. Dann werden die beiden Volumenformen α und β in $\Omega^m(M)$ **äquivalent** bezeichnet, wenn es eine Funktion f in $\varepsilon(M)$ gibt, so dass für jedes $p \in M$ gilt, dass $f(p) > 0$ und $\alpha = f\beta$. Dies stellt offensichtlich eine Äquivalenzrelation auf der Menge aller Volumenformen von M dar.

Ferner sei $\alpha \in \mathcal{O}_r := \mathcal{O}_r(M)$, eine Orientierung von M , dann ist $-\alpha$ eine Volumenform, die nicht zur \mathcal{O}_r gehört sondern wird die zugehörige Äquivalenzklasse mit $-\mathcal{O}_r$ als **inverse** Orientierung zur \mathcal{O}_r bezeichnet.

Satz 2.6.2.10 Eine orientierbare Mannigfaltigkeit ist dann und nur dann zusammenhängend, wenn sie genau zwei Orientierungen besitzt [AE08e].

Satz 2.6.2.11 Sei folgende Bedingungen erfüllbar

- $m \geq 2$;
- M ist eine m -dimensionale orientierte Mannigfaltigkeit.
- Falls M berandet (2.6.1.6), wird ∂M durch die äußere Normale (**Abbildung 2.12**) orientiert.

Wir bezeichnen mit $i : \partial M \hookrightarrow M$ die natürliche Einbettung (2.6.2.6) und damit

$$\int_{\partial M} \omega := \int_{\partial M} i^* \omega = \int_{\partial M} \omega|_{\partial M}, \quad \omega \in \Omega^{m-1}(M),$$

falls $\omega|_{\partial M}$. Außerdem setzen wir $\int_{\emptyset} \omega := 0$. Der **Stokes** Satz besagt, dass

$$\int_M d\omega = \int_{\partial M} \omega \quad \forall \omega \in \Omega_c^{m-1}(M), \quad (2.6.15)$$

wobei der Index c bezieht sich auf kompaktem Träger der ω , also außerhalb der kompakten Menge verschwindet.

Korollar 2.6.2.12 Sei M eine kompakte (2.2.1), orientierte (2.6.2.3), glatte n -dimensionale Mannigfaltigkeit (ohne Rand). Das Integral jeder **exakten**^{IV} n -Form auf M ist dann gleich Null [AE08b][ML19].

2.6.3 Laplace-Operatoren

Die Laplace-Operatoren eines Simplicialkomplexes führen zu einem Analogon, das auf Eckmann zurückgeht, des Hodge-Satzes in der **riemannschen** Geometrie. Sie bieten auch nützliche Werkzeuge für das Studium der Geometrie von Simplicialkomplexen über ihre Kohomologiegruppen

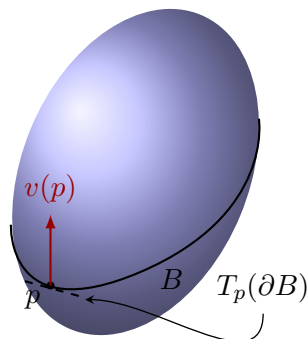


Abbildung 2.12: Der **äußere Einheitsnormalenvektor** $v(p)$.

^{IV} In der Differentialgeometrie und -topologie bezieht sich eine **exakte** n -Form auf eine Differentialform, die als äußere Ableitung einer $(n-1)$ -Form geschrieben werden kann. Das bedeutet, dass eine n -Form ω exakt ist, wenn es eine $(n-1)$ -Form η gibt, so dass $\omega = d\eta$.

hinaus. Angenommen, Σ ist ein simplizialer Komplex und durch $[\sigma]$ wird ein orientiertes Simplex bezeichnet, das heißt, eine geordnete Menge $[v_0, \dots, v_q]$ von Knoten. Eine ungerade Permutation der Knoten ändert die Orientierung, eine gerade bewahrt sie. Auch für das Monoid M des vorherigen Abschnitts nehmen wir das reelle Feld \mathbb{R} . Die **Koketten**-Monoide oder -Gruppen $C^q(\Sigma, \mathbb{R})$ sind dann Vektorräume über \mathbb{R} . Bezüglich der Orientierungen gilt für jedes $f \in C^q(\Sigma, \mathbb{R})$,

$$f(-\sigma_q) = -f(\sigma_q), \quad (2.6.16)$$

das heißt, eine **Orientierungsänderung** führt zu einem Minuszeichen. Wir wählen dann Skalarprodukte $(\cdot, \cdot)_{C^q}$ auf den $C^q(\Sigma, \mathbb{R}) = C^q$ für Abkürzung.

Definition 2.6.3.1 (Korand-Operator) Der adjungierte Operator

$$(\delta^q)^* : C^{q+1}(\Sigma, \mathbb{R}) \rightarrow C^q(\Sigma, \mathbb{R})$$

des **Korand**-Operators δ^q ist definiert durch

$$(\delta^q f_1, f_2)_{C^{q+1}} = (f_1, (\delta^q)^* f_2)_{C^q},$$

für $f_1 \in C^q(\Sigma, \mathbb{R})$ und $f_2 \in C^{q+1}(\Sigma, \mathbb{R})$. Die zugehörige Morphismen stellt wie folgt dar

$$C^{q-1}(\Sigma, \mathbb{R}) \xrightleftharpoons[\delta^{q-1*}]{\delta^{q-1}} C^q(\Sigma, \mathbb{R}) \xrightleftharpoons[\delta^{q*}]{\delta^q} C^{q+1}(\Sigma, \mathbb{R}), \quad (2.6.17)$$

Definition 2.6.3.2

► **Up-Laplace-Operator:** Der q -dimensionale kombinatorische Up-Laplace-Operator oder einfach q -Up-Laplace-Operator des Simplicialkomplexes Σ ist definiert durch

$$L_{\text{up}}^q := (\delta^q)^* \delta^q.$$

► **Down-Laplace-Operator:** der q -dimensionale kombinatorische Down-Laplace-Operator oder q -Down-Laplace-Operator ist

$$L_{\text{down}}^q := \delta^{q-1} (\delta^{q-1})^*.$$

► **Laplace-Operator:** der q -dimensionale kombinatorische Laplace-Operator oder q -Laplace-Operator wird dann

$$L^q := L_{\text{up}}^q + L_{\text{down}}^q = (\delta^q)^* \delta^q + \delta^{q-1} (\delta^{q-1})^*.$$

Bemerkung 2.6.3.3 Für $q = 0$, das heißt, wenn wir die Operatoren auf den Knoten eines Simplicialkomplexes betrachten, haben wir $L_{\text{down}}^0 = 0$, und daher

$$L^0 = L_{\text{up}}^0. \quad (2.6.18)$$

Ähnlich, für $q = \dim \Sigma$, verschwindet der Up-Laplacian, und

$$L^{\dim \Sigma} = L_{\text{down}}^{\dim \Sigma}.$$

Damit sind Die Operatoren L_{up}^q , L_{down}^q und L^q offensichtlich selbstadjungiert.

Lemma 2.6.3.4 Die Operatoren L_{up}^q , L_{down}^q , L^q sind nicht-negativ, das heißt, sie erfüllen

$$(L^q f, f)_{C^q} \geq 0 \text{ für alle } f \in C^q.$$

Beweis. Wir lassen den Index C^q in unserer Notation der Skalarprodukte zur Vereinfachung fallen. Dann haben wir

$$(L_{\text{up}}^q f, f) = ((\delta^q)^* \delta^q f, f) = (\delta^q f, \delta^q f) \geq 0. \quad (2.6.19)$$

$$(L_{\text{down}}^q f, f) = (\delta^{q-1} (\delta^{q-1})^* f, f) = ((\delta^{q-1})^* f, (\delta^{q-1})^* f) \geq 0. \quad (2.6.20)$$

$$(L^q f, f) = (\delta^q f, \delta^q f) + ((\delta^{q-1})^* f, (\delta^{q-1})^* f) \geq 0. \quad (2.6.21)$$

□

Korollar 2.6.3.5 Aus (2.6.19)–(2.6.21) folgt es:

$$L_{\text{up}}^q f = 0 \quad \text{genau dann, wenn} \quad \delta^q f = 0 \quad (2.6.22)$$

$$L_{\text{down}}^q f = 0 \quad \text{genau dann, wenn} \quad (\delta^{q-1})^* f = 0 \quad (2.6.23)$$

$$L^q f = 0 \quad \text{genau dann, wenn} \quad \delta^q f = 0 \text{ und } (\delta^{q-1})^* f = 0 \quad (2.6.24)$$

Bemerkung 2.6.3.6 Da die Operatoren L_{up}^q , L_{down}^q und L^q selbstadjungierte, nicht-negative Operatoren auf endlichdimensionalen Hilberträumen (2.2.6) sind, erfüllen sie die Bedingungen des Satzes (2.6.5).

Satz 2.6.3.7 Die Eigenwerte der Operatoren $L_{\text{up}}^q(\Sigma)$, $L_{\text{down}}^q(\Sigma)$ und $L^q(\Sigma)$ sind reell und nicht-negativ. Korollar 2.6.3.5 charakterisiert den Eigenwert 0. Die anderen Eigenwerte sind dann positiv. Darüber hinaus lassen sich die Eigenwerte durch eine Variationscharakterisierung beschreiben, wie im Satz 2.6.5 dargestellt.

Satz 2.6.3.8 (Diskrete Hodge's Satz) Für einen simplizialkomplex Σ gilt

$$\ker L^q(\Sigma) \cong H^q(\Sigma, \mathbb{R}).$$

Somit entspricht die Vielfachheit des Eigenwerts 0 des Operators $L^q(\Sigma)$ der Dimension von $H^q(\Sigma, \mathbb{R})$, das heißt, der Betti-Zahl b_q .

Beweis. Nach (2.6.24) haben wir

$$\ker L^q(\Sigma) = \ker \delta^q \cap \ker (\delta^{q-1})^* = \ker \delta^q \cap (\text{im } \delta^{q-1})^\perp \cong H^q(\Sigma, \mathbb{R}).$$

Außerdem lässt sich leicht überprüfen, dass $\dim H^q(\Sigma, \mathbb{R}) = \dim H^q(\Sigma, \mathbb{R}) = b_q$ ist. \square

Bemerkung 2.6.3.9 Während Kohomologiegruppen, ähnlich wie Homologiegruppen, als Quotienten definiert wurden, das heißt als Äquivalenzklassen von Elementen von $C^q(\Sigma)$, liefert uns der Satz 2.6.3.8 konkrete Repräsentanten (2.5.1.12) in $C^q(\Sigma)$ dieser Äquivalenzklassen, die sogenannten **harmonischen Koketten** (2.6.4).

Bemerkung 2.6.3.10 Wir stellen fest, dass der Satz 2.6.3.8 **nicht** von der Wahl der Skalarprodukte auf den Räumen $C^q(\Sigma)$ abhängt (obwohl dies für die harmonischen Koketten gilt). Dieser Satz befasst sich mit dem Eigenwert 0 des Laplace-Operators. Wir werden nun den nicht-null Teil des Spektrums untersuchen. Da $\delta^q \delta^{q-1} = 0$ und $(\delta^{q-1})^*(\delta^q)^* = 0$ ist (siehe (2.6.17)),

$$\begin{aligned} \operatorname{im} L_{\text{down}}^q(\Sigma) &\subset \operatorname{ker} L_{\text{up}}^q(\Sigma) \\ \operatorname{im} L_{\text{up}}^q(\Sigma) &\subset \operatorname{ker} L_{\text{down}}^q(\Sigma). \end{aligned}$$

Daher ist λ ein von null verschiedener Eigenwert von $L^q(\Sigma)$ genau dann, wenn er ein von null verschiedener Eigenwert von entweder $L_{\text{up}}^q(\Sigma)$ oder $L_{\text{down}}^q(\Sigma)$ ist. Daher erfüllen die von null verschiedenen Teile der Spektren

$$\operatorname{spec}_{\neq 0}(L^q(\Sigma)) = \operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{up}}^q(\Sigma)) \cup \operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{down}}^q(\Sigma)). \quad (2.6.25)$$

Die Vielfachheit des Eigenwerts 0 kann jedoch unterschiedlich sein. Da $\operatorname{spec}_{\neq 0}(AB) = \operatorname{spec}_{\neq 0}(BA)$ für lineare Operatoren A und B auf Hilberträumen gilt, erhalten wir die folgende Gleichheit:

$$\operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{up}}^q(\Sigma)) = \operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{down}}^{q+1}(\Sigma)). \quad (2.6.26)$$

Aus (2.6.25) und (2.6.26) schließen wir, dass jede der drei Familien von Multimengen

$$\begin{aligned} &\{\operatorname{spec}_{\neq 0}(L^q(\Sigma)) \mid 0 \leq q \leq m\}, \{\operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{up}}^q(\Sigma)) \mid 0 \leq q \leq m-1\} \\ \text{oder} &\quad \{\operatorname{spec}_{\neq 0}(L_{\text{down}}^q(\Sigma)) \mid 1 \leq q \leq m\}, \end{aligned}$$

wobei $m = \dim \Sigma$, die anderen beiden bestimmt. Daher genügt es, nur eine von ihnen zu betrachten. Im Folgenden werden wir oft das Argument Σ aus unseren Laplace-Operatoren fallenlassen.

Bemerkung 2.6.3.11 (Laplacian Hodge-Zerlegung) Die Hodge-Zerlegung kann unter Beachtung (2.5.3.10), (2.5.10) und des Satzes 2.6.3.8 für ein q -Kette C^q wie folgt dargestellt werden:

$$C_q = \operatorname{im}(\delta_{q-1}) \oplus \operatorname{ker}(L_q) \oplus \operatorname{im}(\delta_q^*) \quad (2.6.27)$$

Definition 2.6.3.12 Ein Skalarprodukt kann mit dem Koketten (2.6.4)

$$\chi = \begin{cases} 1 & \text{auf } \sigma \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und aus einer Gewichtsfunktion w , die jedem Simplex σ eine positive reelle Zahl zuordnet, auf dem

Raum $C^q(\Sigma, \mathbb{R})$ wie folgt beschrieben werden:

$$(f, g)_{C^q} = \sum_{\sigma \in S_q} w(\sigma) f([\sigma]) g([\sigma]), \quad (2.6.28)$$

wobei S_q das Raum von q -Simplizes ist. Mit dieser Skalarprodukt ergibt sich folglich ein Orthonormalbasis von für $C^q(\Sigma, \mathbb{R})$, nämlich,

$$\left\{ f_\sigma = \frac{1}{\sqrt{w(\sigma)}} \chi_\sigma : \sigma \in S_q \right\}.$$

Definition 2.6.3.13 Der Grad eines q -Simplex σ innerhalb eines Simplicialekomplexes wird definiert als

$$\deg \sigma = \sum_{\rho \in S_{q+1}(\Sigma) : \sigma \in \partial \rho} w(\rho).$$

Definition 2.6.3.14

► **Normalisierter Laplace-Operator:** Wenn die Gewichtsfunktion (w) auf (Σ) die Bedingung

$$w(\sigma) = \deg \sigma, \quad \forall \sigma \in S_q(\Sigma), \quad (2.6.29)$$

erfüllt, nennt man den auf dem Kokettenkomplex von Σ definierten Laplace-Operator den **gewichteten normalisierten** kombinatorischen Laplace-Operator. Wenn zusätzlich die Gewichte aller Facetten (2.5.2) gleich eins sind, wird der Operator als **normalisierter** kombinatorischer Laplace-Operator bezeichnet.

► **q -Up-Laplace-Operator:** Bie der Annahme (2.6.29) wird der q -Up-Laplace-Operator dann durch einfache lineare Algebra gegeben, nämlich

$$\begin{aligned} (L_{\text{up}}^q f)([\sigma]) &= \sum_{\substack{\rho \in S_{q+1}: \\ \sigma \in \partial \rho}} \frac{w(\rho)}{w(\sigma)} f([\sigma]) \\ &+ \sum_{\substack{\sigma' \in S_q : \sigma \neq \sigma', \\ \sigma, \sigma' \in \partial \rho}} \frac{w(\rho)}{w(\sigma)} \mathbf{sgn}([\sigma], \partial[\rho]) \mathbf{sgn}([\sigma'], \partial[\rho]) f([\sigma']). \end{aligned} \quad (2.6.30)$$

► **q -Down-Laplace-Operator:** Bie der Annahme (2.6.29) der q -Down-Laplace-Operator ist definiert durch

$$\begin{aligned} (L_{\text{down}}^q f)([\sigma]) &= \sum_{\tau \in \partial \sigma} \frac{w(\sigma)}{w(\tau)} f([\sigma]) \\ &+ \sum_{\sigma' : \sigma \cap \sigma' = \tau} \frac{w(\sigma')}{w(\tau)} \mathbf{sgn}([\tau], \partial[\sigma]) \mathbf{sgn}([\tau], \partial[\sigma']) f([\sigma']). \end{aligned} \quad (2.6.31)$$

Bemerkung 2.6.3.15 Wenn (2.6.29) und die Facettengewichte 1 sind, d.h. bei der Berechnung des

normalisierten kombinatorischen Up-Laplacians, vereinfacht sich (2.6.30) zu

$$(L_{\text{up}}^q f)([\sigma]) = f([\sigma]) + \frac{1}{\deg \sigma} \sum_{\substack{\sigma' \in S^q: \sigma \neq \sigma', \\ \sigma, \sigma' \in \partial \rho}} w(\rho) \mathbf{sgn}([\sigma], \partial[\rho]) \mathbf{sgn}([\sigma'], \partial[\rho]) f([\sigma']). \quad (2.6.32)$$

[JJ23f]

2.7 Laplace-Operatoren auf Graphen

In diesem Abschnitt werden die Eigenschaften von Laplace-Operatoren auf Graphen untersucht, die für die speziellen Fälle des algebraischen und des normalisierten Laplace-Operators relevant sind. Diese Diskussion bildet den Auftakt zu einem Kapitel über Laplace-Operatoren auf der Knotenmenge eines simplizialen Komplexes, wobei insbesondere der Fall $q = 0$ aus Abschnitt 2.6.3 betrachtet wird. Da die Definition des Laplace-Operators lediglich Knoten und Kanten involviert, liegt der Fokus auf Graphen.

Die Notation aus Abschnitt 2.6.3 verwendet $[v_1, v_2]$, um eine orientierte Kante zwischen den Knoten v_1 und v_2 zu bezeichnen. Für die entsprechende nicht orientierte Kante wird (v_1, v_2) oder $(v_1 v_2)$ geschrieben. Das Gewicht einer solchen Kante wird mit $w_{v_1 v_2}$ angegeben, wobei für nicht orientierte Simplizes $w_{v_1 v_2} = w_{v_2 v_1}$ gilt.

Der hier verfolgte Ansatz leitet die Formeln für die Laplace-Operatoren auf Graphen als Spezialfälle derjenigen auf simplizialen Komplexen ab. Es wird davon ausgegangen, dass der Graph keine Schleifen enthält, also keine Kanten der Form (vv) für einen Knoten v . Die Formel für den Knoten-Laplacian L bleibt jedoch auch im Falle von Schleifen gültig.

Präliminarien 2.7.1

- **Nachbarn:** In einem ungewichteten Graphen werden zwei Knoten v_1, v_2 als Nachbarn bezeichnet, wenn sie durch eine Kante verbunden sind, was als $v_1 \sim v_2$ notiert wird. Bei einem gewichteten Graphen gelten v_1 und v_2 als Nachbarn, wenn $w_{v_1 v_2} \neq 0$ ist. Der Grad eines Knotens wird definiert als

$$\deg v = \sum_{v'} w_{vv'}. \quad (2.7.1)$$

- **Ungewichteter Graph:** Als ein Spezialfall eines gewichteten Graphen wird ein ungewichteter Graph mit dem $w_{v_1 v_2} = 1$ für jede Nachbarn v_1, v_2 und andersfalls mit 0. Im ungewichteten Fall entspricht der Grad $\deg v$ der Anzahl der Nachbarn von v .
- **Skalarprodukt:** Für die Konstruktion eines Laplace-Operators ist die Wahl eines Skalarprodukts erforderlich. Hier wird ein Skalarprodukt auf Funktionen, die auf der Knotenmenge definiert sind, in der Form

$$(f, g) := \sum_v b_v f(v) g(v) \quad (2.7.2)$$

für positive Knoten-Gewichte b_v verwendet. In Bezug auf den Abschnitt 2.6.3 wird ein Skalarprodukt auf Kantenfunktionen ω, γ analog definiert als

$$(\omega, \gamma) := \sum_e \omega(e) \gamma(e). \quad (2.7.3)$$

- **Differenzoperator:** Obwohl orientierte Kanten und die Relation (2.6.16) berücksichtigt werden sollten, spielen diese Aspekte in diesem Abschnitt keine Rolle, und es werden lediglich nicht orientierte Kanten betrachtet. Tatsächlich hat die Orientierung keinen Einfluss auf die Skalarprodukte im (2.7.4). Der Differenzoperator für Knotenfunktionen f wird definiert als

$$\delta f(v, v') := f(v) - f(v') \text{ für eine Kante } (vv'), \quad (2.7.4)$$

und entsprechend ergibt sich für das Skalarprodukt

$$(\delta f, \delta g) = \sum_{e=(vv')} (f(v) - f(v'))(g(v) - g(v')).$$

- **Adjungiertes δ^* :** Bezüglich der Produkte wird das adjungierte δ^* von δ als

$$(\delta f, \delta g) = (\delta^* \delta f, g) = (f, \delta^* \delta g), \quad (2.7.5)$$

berechnet.

- **Laplace-Operator:** Auf einem Graphen mit Knoten-Gewichten b_v wird der Laplace-Operator definiert als

$$Lf(v) := \delta^* \delta f(v) = \frac{1}{b_v} \left(\deg v f(v) - \sum_{v' \sim v} f(v') \right). \quad (2.7.6)$$

Bemerkung 2.7.2 Der Laplacian L wird als Mittelwertoperator interpretiert, der den Wert einer Funktion f an einem Knoten v mit dem Durchschnitt der Werte an den benachbarten Knoten vergleicht. In Bezug auf Matrizen auf $V \times V$,

mit der **Adjazenzmatrix**

$$A := (a(vv'))_{v,v' \in V} := \begin{cases} 1 & \text{falls } v \sim v' \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (2.7.7)$$

der **Gradmatrix**

$$D := \mathbf{diag}(\deg v)_{v \in V}, \quad (2.7.8)$$

und der Knoten-**Gewichtsmatrix**

$$B := \mathbf{diag}(b_v)_{v \in V}, \quad (2.7.9)$$

lässt sich der **Laplacian** als

$$L = B^{-1}(D - A) \quad (2.7.10)$$

darstellen.

Lemma 2.7.3

1. L ist selbstadjungiert bezüglich des Skalarprodukts (2.7.2), und daher sind alle seine Eigenwerte reell.
2. L ist nicht negativ im Sinne von

$$(Lf, f) \geq 0 \quad \text{für alle } f.$$

3. Die Eigenwerte von L sind **stationäre**/kritische Werte und die Eigenfunktionen **stationäre** Punkte des Funktional

$$\frac{(Lf, f)}{(f, f)} \quad (f \text{ nicht identisch } 0).$$

4. Eigenfunktionen f_i, f_j für Eigenwerte λ_i, λ_j mit $i \neq j$ sind orthogonal (oder können orthogonal gewählt werden, wenn $\lambda_i = \lambda_j$), das heißt,

$$(f_i, f_j) = 0.$$

5. Für Eigenwerte λ_i mit $i \geq 2$ erfüllen die Eigenfunktionen f_i

$$\sum_v b_v f_i(v) = 0. \tag{2.7.11}$$

Beweis. Die Punkte 1 und 2 folgen direkt aus den (2.7.5) und (2.7.6). Die Punkte 3 und 4 sind Konsequenzen aus dem Satz 2.6.5. Punkt 5 ergibt sich aus der Orthogonalität zur konstanten Funktion **1**, die eine Eigenfunktion zum Eigenwert null ist (d.h. $\lambda_1 = 0$ siehe auch Lemma 2.7.4). \square

Lemma 2.7.4 Der kleinste Eigenwert ist

$$\lambda_1 = 0.$$

Genauer gesagt, die Multiplikation des Eigenwerts 0 entspricht der Anzahl der Zusammenhangskomponenten von $\Gamma = (V, E)$. (Eine Zusammenhangskomponente C ist eine maximale Teilmenge von V mit der Eigenschaft, dass es für jedes Paar von Knoten $v, v' \in C$ Knoten $v_0, v_1, \dots, v_n \in C$ gibt mit $v_0 = v, v_n = v'$ und $v_{j-1} \sim v_j$ für $j = 1, \dots, n$.)

Beweis. Eine konstante Funktion **1** erfüllt $L\mathbf{1} = 0$ und ist daher eine Eigenfunktion für den Eigenwert 0. Und in jeder Komponente können wir eine andere Konstante als Eigenfunktion wählen. In jeder Komponente sind jedoch die Konstanten die einzigen Eigenfunktionen für den Eigenwert 0. Tatsächlich, wenn eine Funktion f mit $Lf = 0$ ein lokales Maximum an einem Knoten v hat, d.h. $f(v) \geq f(v')$ wann immer $v' \sim v$, dann $f(v) \geq \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v')$, und wenn $Lf = 0$, müssen wir Gleichheit haben, d.h. $f(v) = f(v')$ wann immer $v \sim v'$. Daraus lässt sich die letzte Behauptung leicht ableiten. \square

2.7.1 Der Algebraische Graph-Laplacian

Der algebraische Graph-Laplacian ist definiert durch

$$Lf(v) = \deg v f(v) - \sum_{v' \sim v} f(v').$$

In diesem Abschnitt betrachten wir nur ungewichtete Graphen $\Gamma = (V, E)$ ohne Schleifen zur Vereinfachung. Wir betrachten den algebraischen Graph-Laplacian, ohne zu sehr ins Detail zu gehen. Der algebraische Graph-Laplacian ist der Operator (2.7.6) für die Knoten-Gewichte:

$$b_v = 1 \quad \text{für alle Knoten } v. \quad (2.7.12)$$

Somit ist für eine Funktion $f : V \rightarrow \mathbb{R}$

$$L(f)(v) = \deg v f(v) - \sum_{v' \sim v} f(v').$$

Dieser Operator ist dann bezüglich des Produkts selbstadjungiert :

$$(f, g) = \sum_v f(v)g(v). \quad (2.7.13)$$

Erinnernd an die Adjazenzmatrix A (2.7.7) auf $V \times V$, die einen Eintrag 1 hat, wenn $v \sim v'$ und sonst 0, und die Diagonalmatrix D (2.7.8) der Knotengrade, können wir schreiben:

$$L = D - A.$$

Wenn der Graph gewichtet ist und wir eine symmetrische Kantengewichtsmatrix $W = (w_{vv'})$ haben und die Grade $\deg v = \sum_{v'} w_{vv'}$ von (2.7.1) und die Gradmatrix $D = \text{diag}(\deg v)$ von (2.7.8), wird der algebraische Laplacian:

$$L = D - W.$$

Wir werden aber nur zum ungewichteten Fall zurückkehren(der gewichtete Fall ist prinzipiell nicht anders). Um die Eigenwerte des algebraischen Laplacians von denen des normalisierten Laplacians in Abschnitt 2.7.2 zu unterscheiden, bezeichnen wir die Eigenwerte des algebraischen Graph-Laplacians L durch:

$$\mu_1 \leq \mu_2 \leq \dots \leq \mu_N. \quad (2.7.14)$$

Im Allgemeinen können wir einige Gleichheiten in (2.7.14) haben. Nach Lemma 2.7.3 sind diese diese Eigenwerte nicht-negative reelle Zahlen und nach dem Lemma 2.7.4 ist $\mu_1 = 0$.

Definition 2.7.1.1 Sei $\Gamma = (V, E)$ ein Graph mit Knoten v_1, \dots, v_N . Der komplementäre Graph Γ^c oder einfach das Komplement von Γ ist der Graph mit der gleichen Knotenmenge und der komplementären Kantenmenge, das heißt, v und v' sind Nachbarn in Γ^c genau dann, wenn sie keine Nachbarn in Γ sind.

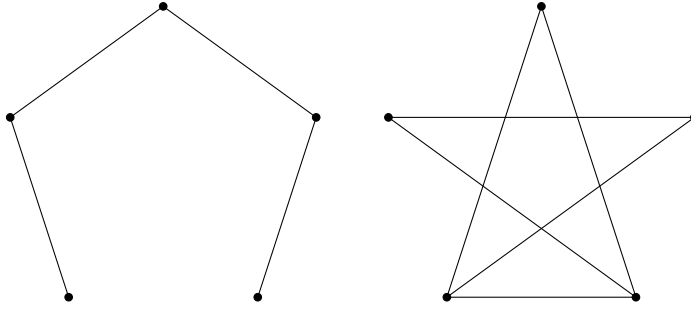


Abbildung 2.13: Ein isomorpher Graph und sein Komplement.

Bemerkung 2.7.1.2 Wir haben nach der Definition dann $(\Gamma^c)^c = \Gamma$ für jeden Graphen. Das Komplement des vollständigen Graphen K_N , d.h. der Graph, bei dem jede zwei verschiedenen Knoten Nachbarn sind, ist der vollständig unverbundene Graph, d.h. der Graph ohne Kanten zwischen seinen Knoten. Im Allgemeinen gilt für $\Gamma = (V, E)$ und $\Gamma^c = (V, E^c)$, dass der Graph $(V, E \cup E^c)$ der vollständige Graph ist (Abbildung 2.13).

Bemerkung 2.7.1.3 Das Komplement $c : \Gamma \rightarrow \Gamma^c$ bildet eine Symmetrie auf dem Moduli-Raum (2.5.1.13) der Graphen. Zur Formulierung der Beziehung zwischen den algebraischen Laplacians von Γ und Γ^c nehmen wir an, dass J die $(N \times N)$ -Matrix mit allen Einträgen **gleich** 1 ist. Außerdem setzen wir zur Vereinheitlichung der Notation auch $I := \text{Id}$. Damit bezeichnen wir den Laplacian eines Graphen Γ jetzt mit L_Γ .

Lemma 2.7.1.4

$$L_\Gamma + L_{\Gamma^c} = NI - J. \quad (2.7.15)$$

Beweis. Wenn ein Knoten v den Grad $\deg_\Gamma v$ in Γ hat, dann ist sein Grad in Γ^c :

$$\deg_{\Gamma^c} v = (N-1) - \deg_\Gamma v \quad (\text{wir haben } N-1 \text{ anstelle von } N \text{ hier, da wir Schleifen ausschließen}).$$

Auch für die Adjazenzmatrizen gilt $A_\Gamma + A_{\Gamma^c} = J - I$ (wieder erscheint $-I$, wenn wir Schleifen ausschließen). Dies zeigt (2.7.1.4). \square

Nach dem Lemma 2.7.1.4 haben folglich sowohl Γ als auch Γ^c den Eigenwert 0.

Satz 2.7.1.5 Sei Γ ein Graph mit N Knoten, mit Eigenwerten μ_i . Für $2 \leq i \leq N$ erfüllen die Eigenwerte μ_i^c von Γ^c :

$$\mu_i^c = N - \mu_{N-i+2}. \quad (2.7.16)$$

Die Eigenfunktionen von L_{Γ^c} für den Eigenwert μ_i^c sind die gleichen wie die von L_Γ für den Eigenwert μ_i .

Beweis. Nach dem Lemma 2.7.4 ist konstante Funktion **1** eine Eigenfunktion für den Eigenwert $\mu_1 = \mu_1^c = 0$ für sowohl L_Γ als auch L_{Γ^c} . Sei f_i eine Eigenfunktion für den Eigenwert μ_i für $i \geq 2$. Dann führt seine Orthogonalität für das Skalarprodukt (2.7.13) nach (2.7.11) in Lemma 2.7.3 für **1** zu $\sum_v f_i(v) = 0$, daher $Jf_i = 0$. Nach (2.7.1.4) folgt es:

$$L_{\Gamma^c} f_i = N f_i - \mu_i f_i = (N - \mu_i) f_i,$$

und daher ist eine Eigenfunktion von L_{Γ^c} für den Eigenwert $N - \mu_i$. Insbesondere entspricht der größte Eigenwert μ_N von L_{Γ} dem Eigenwert μ_2^c von L_{Γ^c} . \square

Korollar 2.7.1.6 Die Eigenwerte eines Graphen mit N Knoten erfüllen

$$\mu_i \leq N. \quad (2.7.17)$$

Dabei wird der Eigenwert N genau dann erreicht, wenn das Komplement Γ^c mehr als eine Zusammenhangskomponente hat. Genauer gesagt, ist seine Multiplikation nach dem Lemma 2.7.1.4 diese Anzahl von Komponenten -1 .

Beweis. Aus (2.7.1.5) folgt es, dass alle Eigenwerte nicht-negativ sind und daher ist mit dem Lemma 2.7.3 der Beweis fertig. \square

Beispiel 2.7.1.7

1. Der Laplace-Operator des vollständig getrennten Graphen (ein isolierter Graph) $\Gamma_{\emptyset} := (V, \emptyset)$, d.h. des Graphen auf N Knoten ohne Kanten, ist $L \equiv 0$. Daher sind alle Eigenwerte 0.
2. Der **vollständige** Graph K_N mit N Knoten und einer Kante zwischen je zwei verschiedenen Knoten ist das Komplement von Γ_{\emptyset} . Nach dem Satz 2.7.1.5 sind seine Eigenwerte:

$$\mu_1 = 0, \mu_2 = \dots = \mu_N = N.$$

Nach (2.7.17) sind dies die größtmöglichen Werte.

2.7.2 Spektrum normalisierter Laplacian auf Graphen

Der normalisierte Laplace-Operator eines Graphen, definiert durch $\Delta f(v) = f(v) - \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v')$, kodiert bzgl. seines Spektrums grundlegende qualitative Eigenschaften des Graphen und ist ein nützliches Werkzeug von Netzwerken. Der Operator, der aus systematischen Konstruktionen auf Simplicialkomplexen mit (normalisierter kombinatorischer Laplacian ($\Delta := L^0$)) abgeleitet wird (siehe Abschnitt 2.7), wird ab jetzt mehr in Betracht kommen. Er ist auch mit Zufalls- und Diffusionsprozessen auf Graphen verbunden. Die Gewichte im Skalarprodukt (siehe Abschnitt 2.7 und (2.7.2)) werden als

$$b_v := \deg v \quad \text{für alle Knoten } v \quad (2.7.18)$$

anders als (2.7.12) gewählt. Der Laplace-Operator auf der Knotenmenge eines Graphen betrifft nur den Knoten v und die anderen Knoten v' , die durch eine Kante mit v verbunden sind (siehe Abschnitt 2.6.3 und (2.6.18)).

Als Spezialfall von (2.6.28) oder (2.7.2) mit der Wahl (2.7.18), ist den Skalarprodukt auf dem Raum der Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, die auf der Knotenmenge V eines Graphen sind, gegeben durch

$$(f, g) = \sum_v \deg v f(v) g(v), \text{ wobei } \deg v = \sum_{v' \sim v} w_{vv'}. \quad (2.7.19)$$

Lemma 2.7.2.1 Auf dem Raum der Funktionen $f : V \rightarrow \mathbb{R}$, die auf der Knotenmenge V eines **gewichteten** Graphen mit dem Skalarprodukt (2.7.19) ist der gewichtete, **normalisierte**, kombinatorische Laplace-Operator gegeben durch

$$L^0(f)(v) = f(v) - \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} w_{vv'} f(v') = \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} w_{vv'} (f(v) - f(v')). \quad (2.7.20)$$

Beweis. Dies folgt aus (2.6.18) und (2.6.30). □

Wenn wir für den Fall, in dem v und v' keine Nachbarn sind, einfach $w_{vv'} = 0$ setzen, können wir die Summen in (2.7.20) über alle $v' \in V$ erweitern.

Korollar 2.7.2.2 Der **normalisiert** kombinatorische Laplace-Operator auf der Knotenmenge eines **ungewichteten** Graphen ist gegeben durch

$$L^0(f)(v) = f(v) - \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v') \quad \text{für eine Funktion } f : V \rightarrow \mathbb{R}. \quad (2.7.21)$$

Damit ergibt sich, dass der Laplace-Operator den Unterschied zwischen dem Wert einer Funktion an einem Knoten v und dem Durchschnitt der Werte an seinen Nachbarn berechnet. In einem gewichteten Graphen werden diese Werte mit dem Gewicht der Kante gewichtet, die sie mit v verbindet.

Bemerkung 2.7.2.3 Wir setzen zuerst zur Betonung betrachtender Laplace-Operator mit

dem Laplacian

$$\Delta := L^0,$$

der Adjazenzmatrix

$$A := (w_{vv'})_{v,v' \in V},$$

und der Gradmatrix

$$D := \text{diag}(\deg v)_{v \in V}.$$

wir erinnern uns gleichzeitig an (2.7.10) und schreiben diese entsprechend wie folgt um

$$\Delta = \text{Id} - D^{-1}A.$$

Um die Kodierung der geometrischen Eigenschaften des zugrunde liegenden Graphen zu verstehen, betrachten wir den einfachsten Fall: einen ungewichteten, endlichen Graphen Γ mit N Knoten. Der Raum der reellen Funktionen auf der Knotenmenge ist somit N -dimensional. Da Δ auf diesem Raum funktioniert hat er genau N Eigenwerte, die nach ihren Multiplikationen geordnet werden

$$\lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N.$$

Nach (2.7.21) ist λ ein Eigenwert mit Eigenfunktion f , wenn

$$f(v) - \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v') = \lambda f(v),$$

oder äquivalent

$$(1 - \lambda)f(v) = \frac{1}{\deg(v)} \sum_{v' \sim v} f(v'). \quad (2.7.22)$$

Um einen Einblick in das Spektrum auf einem Graph zu erhalten, erinnern wir uns daran, dass gemäß Lemma 2.7.10, Satz 2.6.5 sowie (2.6.18) und (2.6.19) die Eigenwerte durch **Minimax**-Werte gegeben sind. Diese Werte sind:

$$\frac{(\Delta g, g)}{(g, g)} = \frac{(\delta^0 g, \delta^0 g)}{(g, g)} = \frac{\sum_{e=(v_1, v_2)} (g(v_1) - g(v_2))^2}{\sum_v \deg(v) g(v)^2} \quad (2.7.23)$$

für die Eigenfunktion f_k mit dem zugehörigen Eigenwert λ_k gilt:

$$\lambda_k = \min_{\substack{f: (f, f_j)=0 \\ \text{für } j=1, \dots, k-1}} \frac{\sum_{e=(v_1, v_2)} (f(v_1) - f(v_2))^2}{\sum_v \deg(v) f(v)^2}. \quad (2.7.24)$$

Lemma 2.7.2.4 Die Eigenwerte eines beliebigen Graphen Γ erfüllen:

$$0 \leq \lambda \leq 2.$$

Beweis. Dass alle Eigenwerte nicht negativ sind, folgt aus ihrer Charakterisierung durch einen quadratischen Ausdruck (2.7.23) (siehe Lemma 2.7.10). Mit anderen Worten, Δ ist ein nicht-negativer Operator. Nach dem Satz 2.6.5 und (2.7.23) ist der größte Eigenwert eines Graphen mit N Knoten:

$$\lambda_N = \max_{g \neq 0} \frac{\sum_{e=(v_1, v_2)} (g(v_1) - g(v_2))^2}{\sum_v \deg(v) g(v)^2}.$$

Der größtmögliche Wert dieser Größe ist 2. Dies ergibt sich mit $(\delta g, \delta g) \leq 2(g, g)$ für alle g , welche wie folgt betrachtet werden kann:

$$\begin{aligned} (\delta g, \delta g) &= \sum_{e=(v_i, v_j)} (g(v_i) - g(v_j))^2 \\ &= \sum_{e=(v_i, v_j)} (g(v_i)^2 + g(v_j)^2 - 2g(v_i)g(v_j)) \\ &\leq \sum_{e=(v_i, v_j)} g(v_i)^2 + \sum_{e=(v_i, v_j)} g(v_j)^2 \\ &= 2 \sum_i \deg(v_i) g(v_i)^2. \end{aligned}$$

Die Gleichheit und folglich die obere Schranke $\lambda = 2$ wird erreicht, falls $g(v_2) = -g(v_1) = 0$ für jede Kante. Dies ist genau dann möglich, wenn der Graph **bipartit** ist, jedoch zum Beispiel **nicht** für

ein Dreieck. □

Bemerkung 2.7.2.5 (Geometrische Eigenschaften eines fundamentalen Graphen)

➤ **Zusammenhang:** Nach dem Satz 2.6.5 und (2.7.23) ist der kleinste Eigenwert:

$$\lambda_1 = \min_{g \neq 0} \frac{\sum_{e=(v_1, v_2)} (g(v_1) - g(v_2))^2}{\sum_v \deg(v) g(v)^2}. \quad (2.7.25)$$

und diesen Minimumwert ist 0. und wird genau für jene Funktionen g_1 erreicht, die $g_1(v_2) = g_1(v_1)$ für jede Kante $e = (v_1, v_2)$ erfüllen. Eine zusammenhängende Komponente eines Graphen Γ ist die maximale Menge von Knoten, von denen jedes Paar v, v' durch eine Kette von Kanten verbunden werden kann, das heißt, durch die Knoten $u_0 = v, u_1, \dots, u_n = v'$ und Kanten $e_i = (u_{i-1}, u_i)$ für $i = 1, \dots, n$. Damit ergibt sich aus der vorhergehenden Diskussion von (2.7.25) finden wir, dass g_1 genau dann eine Eigenfunktion für den Eigenwert 0 ist, wenn g_1 auf jeder zusammenhängenden Komponente von Γ konstant ist. Somit entspricht die Vielfachheit des Eigenwertes 0 der Anzahl der zusammenhängenden Komponenten des Graphen. Wir nennen den Graphen Γ zusammenhängend, falls er nur eine zusammenhängende Komponente hat. Daher wird ein zusammenhängender Graph durch die Eigenschaft charakterisiert, dass 0 ein einfacher Eigenwert von Δ ist. darüberhinaus können wir aus (2.7.24) und (2.7.25)

$$\lambda_1 = \min_{\substack{g \neq 0 \\ \sum_v g(v) = 0}} \frac{\sum_{e=(v_1, v_2)} (g(v_1) - g(v_2))^2}{\sum_v \deg(v) g(v)^2},$$

da die Funktionen, die orthogonal zu den Konstanten bzw. die Eigenfunktionen für $\lambda_1 = 0$ sind, sind diejenige, die folgende Gleichung treffen:

$$\sum_v \deg(v) g(v) = 0. \quad (2.7.26)$$

➤ **Reguläre Graphen:** Ein Graph ist k -regulär, wenn alle Knoten den gleichen Grad k haben. Für einen regulären Graphen sind der algebraische Laplace-Operator L und der normalisierte Laplace-Operator Δ durch

$$L = k\Delta$$

verbunden, und daher sind auch ihre Spektren durch

$$\mu_i = k\lambda_i$$

verbunden. Im Allgemeinen gibt es jedoch keine einfache Beziehung zwischen den Spektren dieser beiden Laplace-Operatoren.

➤ **Bipartitheit:** Ein Graph Γ ist bipartit, wenn seine Knotenmenge V in zwei disjunkte Mengen V_1 und V_2 zerlegt werden kann, sodass keine Kanten Knoten innerhalb der gleichen Komponente verbinden.

- **Vollständigkeit:** Ein Graph mit N Knoten (ohne Schleifen) ist vollständig und wird durch K_N bezeichnet, wenn jedes Paar von Knoten durch eine Kante verbunden ist. Das Spektrum von K_N ist einfach zu bestimmen. Wie jeder zusammenhängende Graph hat K_N den Eigenwert $\lambda_1 = 0$ mit Vielfachheit 1, und die Eigenfunktion f_1 ist konstant. Die anderen Eigenfunktionen erfüllen (2.7.26). Für einen vollständigen Graphen K_N besteht das Spektrum aus dem Eigenwert 0 mit Vielfachheit 1 und dem Eigenwert $\frac{N}{N-1}$ mit Vielfachheit $N - 1$. In der Tat setzen wir für $\lambda_1 = 0$ und sein zugehörige Eigenfunktion f_1 als konstant $c \neq 0$ z.B. $c = 1$. Die anderen Eigenfunktionen erfüllen (2.7.26). Insbesondere wir haben auf K_N :

$$\begin{aligned} \Delta f(v) &= f(v) - \frac{1}{\deg v} \sum_{v', v' \sim v} f(v') = f(v) - \frac{1}{N-1} \sum_{v' \neq v} f(v') \\ &= \underbrace{\left(1 + \frac{1}{N-1}\right)}_{f(v) \stackrel{(2.7.26)}{=} \sum_{v' \neq v} f(v')} f(v) = \frac{N}{N-1} f(v) \end{aligned} \quad (2.7.27)$$

- **Vollständigkeit mit Schleifen:** Wenn wir auch Schleifen zulassen, sodass für jedes Paar von Knoten v_0, v_1 (ob unterschiedlich oder nicht) eine Kante existiert, erhalten wir den vollständigen Graphen mit Schleifen K_N^0 . Das Spektrum von K_N^0 besteht aus 0 mit Vielfachheit 1 und 1 (statt $\frac{N}{N-1}$ für K_N) mit Vielfachheit $N - 1$. Damit ist das Laplacian einer Funktion f definiert durch:

$$\Delta f(v) = f(v) - \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N f(v_\alpha), \quad (2.7.28)$$

wobei $V = \{v_1, \dots, v_N\}$ Knotenmenge ist. Wenn $F : V \rightarrow H$ ihre Werte in einem Hilbertraum mit Skalarprodukt (\cdot, \cdot) nimmt (siehe auch Präliminarien 2.2.6), sind wie z.B.

$$C_{\alpha\beta} := \frac{1}{N} (\Delta F(v_\alpha), \Delta F(v_\beta)), \quad (\alpha, \beta = 1, \dots, N), \quad (2.7.29)$$

die Kovarianz der Werte der Funktion F .

- **Knotenverdopplung:** Wenn der Graph doppelte Knoten enthält, das heißt, es gibt Knoten v_1, v_2 , die nicht durch eine Kante verbunden sind, aber die gleichen Nachbarn haben, können wir eine Funktion f definieren als:

$$f(v) = \begin{cases} +1 & \text{für } v = v_1, \\ -1 & \text{für } v = v_2, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.7.30)$$

Diese Funktion f ist eine Eigenfunktion für den Eigenwert 1. Tatsächlich folgt aus der Bedingung für eine Eigenfunktion für den Eigenwert 1, dass $\sum_{v' \sim v} f(v') = 0$ für jeden Knoten v gelten muss. Die konstruierte Funktion f erfüllt diese Bedingung, weil $f(v') = 0$.

- **Isospektrale Graphen:** Zwei unterschiedliche Graphen Γ_1 und Γ_2 werden als **isospektral** bezeichnet, wenn ihre Spektren, d.h. die Eigenwertmenge von Δ mit ihren Vielfachheiten, iden-

tisch sind. Wir haben gesehen, dass der vollständige Graph K_N durch sein Spektrum eindeutig charakterisiert ist, das heißt, es gibt keinen anderen Graphen mit dem gleichen Spektrum. Es existieren jedoch Paare von isospektralen Graphen, die nicht **isomorph** sind.

Lemma 2.7.2.6 Ein Graph Γ ist genau dann **bipartit**, wenn sein Spektrum **symmetrisch** um 1 liegt, das heißt, λ ist ein Eigenwert, wenn und nur wenn $2 - \lambda$ ein Eigenwert ist.

Beweis. Sei λ ein Eigenwert mit der Eigenfunktion f auf einem Graph mit der Knotenmenge $V = V_0 \cup V_1$. Dann ist

$$\tilde{f} := \begin{cases} f(v) & \text{für } v \in V_0 \\ -f(v) & \text{für } v \in V_1 \end{cases}$$

ein Eigenfunktion für den Eigenwert $2 - \lambda$. In der Tat haben wir nach (2.7.22)

$$(1 - \lambda)f(v) = \frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v'),$$

und daher

$$(1 - (2 - \lambda))f(v) = (\lambda - 1)f(v) = -\frac{1}{\deg v} \sum_{v' \sim v} f(v')$$

Damit ergibt sich aus der Definition \tilde{f} , dass die ein Eigenfunktion für den Eigenwert $2 - \lambda$. \square

Wir berechnen nun den Kantenlaplace-Operator L^1 auf einem Graphen. Wir fokussieren uns dabei auf den ungewichteten Fall. Wir betrachten eine orientierte Kante $e = [v_1, v_2]$. Sei $f : V \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion auf der Knotenmenge V unseres Graphen. Dann wird Gleichung (2.6.5) zu

$$\delta f(e) = f(v_2) - f(v_1).$$

Dies legt nahe, antisymmetrische Kantenfunktionen $\omega : E \rightarrow \mathbb{R}$ zu betrachten, die die Bedingung

$$\omega[v_2, v_1] = -\omega[v_1, v_2]$$

erfüllen müssen.

Wir definieren zudem ein Skalarprodukt

$$(\omega_1, \omega_2) = \sum_e \omega_1(e) \omega_2(e). \quad (2.7.31)$$

Nach dem Schema des Abschnitt 2.6.3 wollen wir das adjungierte δ^* von δ bezüglich der Produkte (2.7.19) und (2.7.31) berechnen, d.h. δ^* muss

$$(f, \delta^* \omega) = (\delta f, \omega)$$

für alle Knotenfunktionen f und alle Kantenfunktionen ω erfüllen. Auf der linken Seite der Gleichung

chung haben wir das Produkt (2.7.19), während auf der rechten Seite (2.7.31) steht. Daher gilt:

$$(f, \delta^* \omega) = \sum_v \deg(v) f(v) \delta^* \omega(v),$$

und

$$\begin{aligned} (\delta f, \omega) &= \sum_{e=[v_1, v_2]} (f(v_2) - f(v_1)) \omega(e) \\ &= \sum_{v_1, v_2} \deg(v_2) f(v_2) \omega(v_1, v_2) - \sum_{v_1, v_2} \deg(v_1) f(v_1) \omega(v_1, v_2), \end{aligned}$$

was zu

$$\delta^* \omega(v) = \frac{1}{\deg(v)} \sum_{v \in e} (-1)^{i(e)} \omega(e)$$

mit

$$i(e) = \begin{cases} 1 & \text{wenn } e = [v, w], \\ 0 & \text{wenn } e = [w, v]. \end{cases}$$

führt.

Wir können nun den Kantenlaplace-Operator $L^1 = \delta \delta^*$ berechnen. Für $e = [v_1, v_2]$ gilt

$$L^1 \omega(e) = \delta \delta^* \omega(e) = \frac{1}{\deg(v_1)} \sum_{v_1 \in g=[v_1, w]} \omega(g) - \frac{1}{\deg(v_2)} \sum_{v_2 \in f=[v_2, w]} \omega(f).$$

Da $L^0 = \delta^* \delta$ und $L^1 = \delta \delta^*$, ergibt sich direkt folgendes Korollar.

Korollar 2.7.2.7 Der Knoten-Laplace-Operator L^0 und der Kanten-Laplace-Operator L^1 auf einem Graphen haben die gleichen von Null verschiedenen Eigenwerte.

Bemerkung 2.7.2.8 Im Allgemeinen sind die Vielfachheiten des Eigenwertes 0 dieser beiden Operatoren unterschiedlich. Tatsächlich operieren die beiden Operatoren auf Vektorräumen unterschiedlicher Dimension. Die Dimension dieses Vektorraums für L^0 ist die Anzahl der Knoten, während sie für L^1 die Anzahl der Kanten ist. Entweder aus dieser Beobachtung oder aus dem Satz 2.6.3.8 schließen wir, dass die Vielfachheit des Eigenwertes 0 von L^0 durch die Bettizahl b_0 (2.5.9) und die von L^1 durch b_1 gegeben ist. Somit ist der Unterschied dieser Vielfachheiten gleich der Euler-Zahl des Graphen,

$$\chi(\Gamma) = |V| - |E| = b_0 - b_1 = \dim \ker L^0 - \dim \ker L^1. \quad (2.7.32)$$

Bemerkung 2.7.2.9 Wir haben bereits beobachtet, dass, wenn der Graph zusammenhängend ist, das heißt, $b_0 = 1$, der Eigenwert 0 von L^0 einfach ist, und nach (2.7.32) die Vielfachheit des Eigenwertes 0 von L^1 dann $|E| - |V| + 1$ ist. Ein zusammenhängender Graph mit $|E| = |V| - 1$ wird als Baum bezeichnet, und dies ist dann genau der Fall, wenn der Kern von L^1 trivial ist. Tatsächlich wird der Eigenwert 0 von L^1 auf geschlossenen Schleifen erreicht, und ein Baum ist dadurch charakterisiert, dass er keine solchen Schleifen besitzt [JJ23k].

Datengetriebene äußere Rechnung

In diesem Kapitel

3.1	Datengetriebene Koränder und Koableitungen	92
3.2	Nichtlineare Störung von Hodge-Laplacian	96
3.3	Wohlgestelltheit	97
3.4	Konstruktion von Kettenkomplexe	100
3.5	PDE-abhängige Optimierung .	102
3.6	Numerische Ergebnisse	105

wird beschrieben, wie die Grphenrechnung-Operatoren in einer Weise parametisiert werden können, die Wiedergewinnung traditioneller DEC-Schemata* für die Diskretisierung von partiellen Differentialgleichungen (en. PDE) als spezifische Instanz ermöglicht. Wir betrachten den de Rham-Komplex (2.6.1.15) als prototypisches Mittel zur Analyse struktur-erhaltender Differentialoperatoren in \mathbb{R}^d und streben an, dessen **diskrete** Approximation auf einem Graphen zu entwickeln. Im Allgemeinen kann die hier vorgestellte Konstruktion verwendet werden, um jede **exakte** Sequenz (2.5.1.4) zu approximieren. In drei Dimensionen wird der de Rham-Komplex als einen Kokettenkomplex (2.6.17) mit den Korand-Operatoren (2.6.3.1) Gradient (2.2.8), Rotation (en. Curl) und Divergenz (2.2.16) für $\Omega \subseteq \mathbb{R}^3$ gegeben durch

$$C^\infty(\Omega) \xrightleftharpoons[\text{div}^*]{\text{grad}} [C^\infty(\Omega)]^3 \xrightleftharpoons[\text{rot}^*]{\text{rot}} [C^\infty(\Omega)]^3 \xrightleftharpoons[\text{grad}^*]{\text{div}} C^\infty(\Omega) . \quad (3.0.1)$$

* Das DEC steht für den englischen Ausdruck "Discrete Exterior Calculus" und wird auf Deutsch als "Diskrete äußere Rechnung" bezeichnet.

3.1 Datengetriebene Koränder und Koableitungen

Unter Berücksichtigung des allgemeinen Falls, in dem $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ liegt, definieren wir neue Korand- und Koableitungsoperatoren, indem wir lernbare metrische Informationen (siehe auch Definition 2.1.1.12) den Graphoperatoren wie folgt zuordnen:

$$d_k := \mathbf{B}_{k+1} \delta_k \mathbf{B}_k^{-1}, \quad \text{und} \quad d_k^* = \mathbf{D}_k^{-1} \delta_k^* \mathbf{D}_{k+1}, \quad (3.1.1)$$

Wobei \mathbf{B}_k und \mathbf{D}_k **diagonale** Tensoren (siehe auch ε -Tensor) mit positiven Einträgen (2.6.1.19) bezeichnen, die den Elementen von C^k Gewichte zuordnen. Diese Tensoren sollen metrische Informationen **kodieren** (2.5.2); in traditionellen **DEC/Kovolumendiskretisierungen** von PDEs entsprechen die Diagonaleinträge **orientierten** Maßen von Gitterentitäten (z.B. Längen, Flächen, Volumen). Dabi werden diese Terme als abstrakte Maße behandelt, die aus Daten gelernt werden können. Die Positivität der Einträge wird durch die Parametrisierung jedes Diagonaleintrags als Quadrat eines trainierbaren Parameters sichergestellt.

Zum Beispiel haben wir in \mathbb{R}^3 :

$$\text{GRAD} = \mathbf{B}_1 \delta_0 \mathbf{B}^{-1}, \quad \text{ROT} = \mathbf{B}_2 \delta_1 \mathbf{B}_1^{-1}, \quad \text{DIV} = \mathbf{B}_3 \delta_2 \mathbf{B}^{-1}, \quad (3.1.2)$$

$$\text{DIV}^* = \mathbf{D}_0^{-1} \delta_0^* \mathbf{D}_1, \quad \text{ROT}^* = \mathbf{D}_1^{-1} \delta_1^* \mathbf{D}_2, \quad \text{GRAD}^* = \mathbf{D}_2^{-1} \delta_2^* \mathbf{D}_3. \quad (3.1.3)$$

Hierbei werden **diskrete** Graphoperationen mit Großbuchstaben dargestellt, während für die entsprechenden Kontinuen[†] (siehe auch Definition 2.6.1.1) Kleinbuchstaben verwendet.

$$\begin{array}{ccccccc} C^0 & \xrightarrow{d_0} & C^1 & \xrightarrow{d_1} & C^2 & \xrightarrow{d_2} & \dots & \xrightarrow{d_{d-2}} & C^{d-1} & \xrightarrow{d_{d-1}} & C^d \\ \mathbf{B}_0 \uparrow & & \mathbf{B}_1 \uparrow & & \mathbf{B}_2 \uparrow & & & & \mathbf{B}_{d-1} \uparrow & & \mathbf{B}_d \uparrow \\ C^0 & \xrightarrow{\delta_0} & C^1 & \xrightarrow{\delta_1} & C^2 & \xrightarrow{\delta_2} & \dots & \xrightarrow{\delta_{d-2}} & C^{d-1} & \xrightarrow{\delta_{d-1}} & C^d \\ \mathbf{D}_0 \uparrow & & \mathbf{D}_1 \uparrow & & \mathbf{D}_2 \uparrow & & & & \mathbf{D}_{d-1} \uparrow & & \mathbf{D}_d \uparrow \\ C^0 & \xleftarrow{d_0^*} & C^1 & \xleftarrow{d_1^*} & C^2 & \xleftarrow{d_2^*} & \dots & \xleftarrow{d_{d-2}^*} & C^{d-1} & \xleftarrow{d_{d-1}^*} & C^d \end{array} \quad (3.1.4)$$

Mit den Definitionen (3.1.2) und (3.1.2) ergibt sich offenbar, dass das Diagramm (3.1.4) kommutativ (2.5.1.3) ist, d.h., $\mathbf{B}_{k+1} \delta_k = d_k \mathbf{B}_k$ und $\mathbf{D}_k^{-1} \delta_k^* = d_k^* \mathbf{D}_{k+1}$. Entsprechend haben wir in \mathbb{R}^3

$$\mathbf{B}_1 \delta_0 = \text{GRAD} \mathbf{B}_0, \quad \mathbf{B}_2 \delta_1 = \text{ROT} \mathbf{B}_1, \quad \mathbf{B}_3 \delta_2 = \text{DIV} \mathbf{B}_2,$$

und

$$\delta_0^* \mathbf{D}^{-1} = \text{DIV}^* \mathbf{D}^{-1}, \quad \mathbf{D}^{-1} \delta_1^* = \text{ROT}^* \mathbf{D}^{-1}, \quad \mathbf{D}^{-1} \delta_2^* = \text{GRAD}^* \mathbf{D}^{-1}.$$

Satz 3.1.1 Die diskreten Ableitungen d_k in (3.1.1) bilden eine **exakte** Sequenz (2.5.1.4), wenn der simpliziale Kettenkomplex (2.5.3.10) $((C^k, \delta_k))$ exakt ist, und insbesondere gilt $d_{k+1} \circ d_k = 0$ (siehe auch den Satz 2.5.7).

[†] Unter einem **Kontinuum** versteht man einen zusammenhängenden kompakten Hausdorff-Raum.

Beweis. Da (3.1.4) ein kommutatives Diagramm ist, bilden die Kettenabbildungen Zyklen zu Zyklen und Ränder zu Rändern ab. Daher, wenn der simpliziale Komplex exakt ist, bildet (3.1.3) eine exakte Sequenz. Zudem kann $d_{k+1} \circ d_k = 0$ anhand der Definitionen (3.1.1) bestätigt werden. \square

Satz 3.1.2 Die diskreten Ableitungen d_k^* in (3.1.1) bilden eine **exakte** Sequenz, wenn der simpliziale Kokettenkomplex (2.6.4) (C^k, d_k) exakt ist, und insbesondere gilt $d_k^* \circ d_{k+1}^* = 0$.

Beweis. In Bezug auf den Definitionen (3.1.1) folgt die Aussage aus der Tatsache, dass (3.1.4) kommutativ ist und aus . Der Rest ist analog zum Beweis vom Satz 3.1.1. \square

Bemerkung 3.1.3 In \mathbb{R}^3 gelten

$$\text{ROT} \circ \text{GRAD} = \text{DIV} \circ \text{ROT} = 0 \text{ (2.2.34) und } \text{DIV}^* \circ \text{ROT}^* = \text{ROT}^* \circ \text{GRAD}^* = 0.$$

Bemerkung 3.1.4 Diese Gruppe von Operatoren werden als datengetriebenes äußere Rechnung bezeichnet, wobei die in \mathbf{B}_k und \mathbf{D}_k **kodierten** metrischen Information aus Daten gelernt wird. Es ist zu beachten, dass in den traditionellen kompatiblen Verfahren niedriger Ordnung diese metrischen Tensoren geometrische Informationen enthalten, die sich auf die orientierten Maße von Gitterentitäten beziehen, wie z.B. Zellvolumen, Flächenmomente, usw. Im Anschluss an die Eigenschaft der exakten Sequenz erbt diese äußere Rechenstruktur die weiteren anderen Eigenschaften des graphischen Rechnungen.

Definition 3.1.5 (Hodge-Laplacian) Auf der Basis der Hodge-Laplacians (2.6.3.2) und (3.1.4) können wir folglich verallgemeinerte datengetriebene Hodge-Laplacians wie folgt definieren,

$$\Delta_k = d_{k-1} d_{k-1}^* + d_k^* d_k.$$

Als Beispiele für praktische Einsatzzwecke kommen folgende Hodge-Laplacians in \mathbb{R}^2 in Betracht:

$$\begin{aligned} \Delta_1 &:= \text{ROT} \circ \text{ROT}^* + \text{GRAD}^* \circ \text{DIV}, \\ \Delta_2 &:= \text{DIV} \circ \text{GRAD}^*. \end{aligned}$$

Bemerkung 3.1.6 Die Hodge-Zerlegung (2.6.27) kann ebenfalls leicht verallgemeinert werden. Dabei werden $\langle v, \mathbf{w} \rangle_k := (v, \mathbf{w})_{\mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1}} = (\mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1} v, \mathbf{w})$ als zugehörige Skalarprodukt (2.2.6) gewählt (siehe auch Bemerkung 2.6.3.10) und seine eingeführte Norm als $\|\cdot\|_k$ dargestellt.

Satz 3.1.7 (Hodge-Zerlegung) Für C^k gilt die folgende Zerlegung:

$$C^k = \text{im}(d_{k-1}) \bigoplus_k \ker(\Delta_k) \bigoplus_k \text{im}(d_k^*), \quad (3.1.5)$$

wobei \bigoplus_k die Orthogonalität (2.2.14) in Bezug auf das $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$ -Skalarprodukt bedeutet.

Beweis. Da (3.1.4) ein kommutatives Diagramm ist und sich aus der Laplacian Hodge-Zerlegung (2.6.27), kann C^k daher in drei Teile zerlegt werden: $\text{im}(d_{k-1})$, $\text{im}(d_k^*)$ und $\ker(\Delta_k)$. Als nächstes

zeigen wir, dass diese Zerlegung orthogonal bzgl. das $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$ -Skalarprodukts ist. Für $\mathbf{u}_{k-1} \in C^{k-1}$ und $\mathbf{u}_{k+1} \in C^{k+1}$ haben wir:

$$\begin{aligned} \langle d_{k-1}\mathbf{u}_{k-1}, d_k^*\mathbf{u}_{k+1} \rangle_k &= (\mathbf{B}_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{D}_{k-1} \delta_k^* \mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1})_{\mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1}} \\ &= (\delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \delta_k^* \mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}) = (\delta_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}) = 0. \end{aligned}$$

Für $\mathbf{h}_k \in \ker(\Delta_k)$ haben wir $d_k^* \mathbf{h}_k = 0$ und $d_k \mathbf{h}_k = 0$, was dazu führt, dass $\delta_{k-1}^* \mathbf{D}_k \mathbf{h}_k = 0$ und $\delta_k \mathbf{B}_k^{-1} \mathbf{h}_k = 0$ gilt. Für $\mathbf{u}_{k-1} \in C^{k-1}$ ergibt sich:

$$\begin{aligned} \langle d_{k-1}\mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{h}_k \rangle_k &= (\mathbf{B}_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{h}_k)_{\mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1}} \\ &= (\mathbf{D}_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \mathbf{h}_k) = (\mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{u}_{k-1}, \delta_k^* \mathbf{D}_k \mathbf{h}_k) = 0. \end{aligned}$$

Andererseits haben wir für $\mathbf{u}_{k+1} \in C^{k+1}$:

$$\begin{aligned} \langle d_k^* \mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{h}_k \rangle_k &= (\mathbf{D}_{k-1} \delta_k^* \mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{h}_k)_{\mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1}} \\ &= (\mathbf{B}_k^{-1} \delta_k^* \mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}, \mathbf{h}_k) = (\mathbf{D}_{k+1} \mathbf{u}_{k+1}, \delta_k \mathbf{B}_k^{-1} \mathbf{h}_k) = 0. \end{aligned}$$

Die Zerlegung ist daher orthogonal zum $\langle \cdot, \cdot \rangle$, womit der Beweis vollständig ist. \square

Beispiel 3.1.8 In \mathbb{R}^3 haben wir die folgende Hodge-Zerlegung, wenn $k = 1$ ist:

$$C^1 = \text{im}(\text{GRAD}) \bigoplus_k \ker(\Delta_1) \bigoplus_k \text{im}(\text{ROT}^*)$$

und wenn $k = 2$:

$$C^2 = \text{im}(\text{ROT}) \bigoplus_k \ker(\Delta_2) \bigoplus_k \text{im}(\text{GRAD}^*)$$

In \mathbb{R}^2 haben wir die folgende Hodge-Zerlegung, wenn $k = 1$ ist:

$$C^1 = \text{im}(\text{ROT}) \bigoplus_k \ker(\Delta_1) \bigoplus_k \text{im}(\text{GRAD}^*)$$

Satz 3.1.9 (Poincaré-Ungleichung) Für jedes k gibt es eine Konstante $c_{P,k}$ so dass:

$$\|z_k\|_k \leq c_{P,k} \|d_k z_k\|_{k+1}, \quad z_k \in \text{im}(d_k^*)$$

eine andere Konstante $c_{P,k}^*$ so dass:

$$\|z_k\|_k \leq c_{P,k}^* \|d_{k-1}^* z_k\|_{k-1}, \quad z_k \in \text{im}(d_{k-1})$$

Für $\mathbf{u}_k \in C^k$ haben wir

$$\inf_{h_k \in \ker(\Delta_k)} \|\mathbf{u}_k - h_k\|_k \leq C (\|d_k \mathbf{u}_k\|_{k+1} + \|d_{k-1}^* \mathbf{u}_k\|_{k-1}),$$

wobei die Konstante $C > 0$ nur von $c_{P,k}$ und $c_{P,k}^*$ abhängt.

Beweis. Diese Ungleichungen folgen direkt aus der Hodge-Zerlegung (3.1.5). \square

Bemerkung 3.1.10 Da es sich hier um eine Matrixdarstellung handelt, ergibt sich durch direkte Berechnung, dass

$$c_{P,k} = \lambda_{\min}(d_k^* d_k)^{-1/2},$$

wobei λ_{\min} den kleinsten nicht-trivialen Eigenwert bezeichnet. Zum Beispiel in \mathbb{R}^3 , wenn $k = 0$:

$$c_{P,0} = \lambda_{\min}(d_0^* d_0)^{-1/2} = \lambda_{\min}(\delta_0^* \mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1 \delta_0)^{-1/2} = \lambda_{\min}(\text{DIV}^* \circ \text{GRAD})^{-1/2}.$$

Es ist auch zu beachten, dass

$$\min_i \{(\mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1)_{ii}\} \lambda(\delta_0^* \delta_0) \leq \lambda(\delta_0^* \mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1 \delta_0) \leq \max_i \{(\mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1)_{ii}\} \lambda(\delta_0^* \delta_0).$$

Dies führt dazu, dass

$$\min_i \{(\mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1)_{ii}\} \lambda_{\min}(\delta_0^* \delta_0) \leq c_{P,0}^{-2} \leq \max_i \{(\mathbf{D}_1 \mathbf{B}_1)_{ii}\} \lambda_{\min}(\delta_0^* \delta_0),$$

was die Poincaré-Konstante mit $\lambda_{\min}(\delta_0^* \delta_0)$ in Beziehung setzt, auch bekannt als der Fiedler-Wert des Graph-Laplacians $L_0 = \delta_0^* \delta_0$ (2.6.3.2).

Satz 3.1.11 (Invertierbarkeit des Hodge-Laplacians) Der k -te Hodge-Laplacian Δ_k ist positiv-semidefinit, mit der Dimension seines Nullraums (2.5.12) gleich der Dimension der entsprechenden Homologie $H^k = \frac{\ker(d_k)}{\text{im}(d_{k-1})}$ (2.6.5).

Beweis. Für $\mathbf{u}_k \in C^k$ haben wir

$$\begin{aligned} \langle \Delta \mathbf{u}_k, \mathbf{u}_k \rangle_k &= \left((\mathbf{B}_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{D}_{k-1}^{-1} \delta_{k-1}^* \mathbf{D}_k + \mathbf{D}_k^{-1} \delta_{k-1}^* \mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1} \delta_k \mathbf{B}_k^{-1}) \mathbf{u}_k, \mathbf{u}_k \right)_{\mathbf{D}_k B^{-1}} \\ &= \left((\mathbf{D}_k \delta_{k-1} \mathbf{B}_{k-1}^{-1} \mathbf{D}_{k-1}^{-1} \delta_{k-1}^* + \mathbf{B}_k^{-1} \delta_{k-1}^* \mathbf{D}_k \mathbf{B}_k^{-1}) \mathbf{u}_k, \mathbf{u}_k \right) \\ &= \langle d_{k-1}^* \mathbf{u}_k, d_{k-1}^* \mathbf{u}_k \rangle_{k-1} + \langle d_{k-1}^* \mathbf{u}_k, d_{k-1}^* \mathbf{u}_k \rangle_{k+1} \\ &= \|d_{k-1}^* \mathbf{u}_k\|_{k-1}^2 + \|d_k \mathbf{u}_k\|_{k+1}^2 \geq 0, \end{aligned}$$

was zeigt, dass Δ_k positiv-semidefinit ist.

Der zweite Teil folgt direkt aus der Hodge-Zerlegung (3.1.5). \square

Bemerkung 3.1.12 Der Satz 3.1.11 besagt, dass ein lineares System des Hodge-Laplacians

$$\Delta_k \mathbf{u}_k = \mathbf{f}_k \tag{3.1.6}$$

gelöst werden kann, solange $\mathbf{f}_k \in C^k$ orthogonal zu $\ker(\Delta_k)$ bezüglich des Skalarprodukts $\langle \cdot, \cdot \rangle_k$ (2.2.6) ist.

3.2 Nichtlineare Störung von Hodge-Laplacian

In vielen Fällen ist es hilfreich, die gemischte Formulierung des Hodge-Laplacian-Problems (3.1.6) zu betrachten, da sie auf einfache Weise Beziehungen zu integralen Gleichgewichtsgesetzen und Erhaltungsprinzipien (2.2.28) herstellt [THH22].

Zu diesem Ziel führen wir eine neue Variable $\mathbf{w}_{k-1} := d_{k-1}^* \mathbf{u}_k$ ein, die einem verallgemeinerten Fluss (2.2.5) entspricht, und die genannte Form (3.1.6) wie folgt:

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_{k-1} - d_{k-1}^* \mathbf{u}_k &= 0, \\ d_{k-1} \mathbf{w}_{k-1} + d_k^* d_k \mathbf{u}_k &= \mathbf{f}_k. \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

Beispiel 3.2.1 Die Problemklasse (3.2.1) beschreibt mehrere kanonische elliptische Operatoren **zweiter** Ordnung (2.4.1.1); zum Beispiel in \mathbb{R}^2 , für $k = 2$ erhalten wir das sogenannte Darcy-Flussmodell:

$$\begin{aligned} \mathbf{F} + \kappa \nabla \phi &= 0 \implies \mathbf{w}_1 - \text{GRAD}^* \mathbf{u}_0 = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{F} &= f \implies \text{DIV} \mathbf{w}_1 = \mathbf{f}_0, \end{aligned}$$

und für $k = 1$ erhalten wir das Magnetostatik-Modell, nach Anwendung eines Vektor**potentials** für das Magnetfeld (2.2.39) und Anwendung einer geeigneten Eichbedingung (2.2.1.4) [THH22]

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{J} &= f \implies w_0 - \text{CURL}^* \mathbf{u}_1 = 0, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \implies \text{CURL} \mathbf{w}_0 + \text{GRAD}^* \circ \text{DIV} \mathbf{u}_1 = \mathbf{f}_1, \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

wobei $\mathbf{J} = \mu \mathbf{B}$.

Bemerkung 3.2.2 Während die Modellform (3.2.2) geeignet ist, um z.B. Diffusionskoeffizienten entsprechend elliptischer Probleme zweiter Ordnung zu erlernen, erfordern realistische Probleme die Berücksichtigung von Nichtlinearitäten. Aus diesem Grund wird eine nichtlineare Störung der Flüsse eingeführt, während die relevanten Erhaltungsaussagen unangetastet bleiben. Dadurch wird die Struktur der äußeren Rechnung und integriert Daten nur in die Flüsse aufrechterhalten, die traditionell eher empirischer (2.1.1.6) sind.

Definition 3.2.3 Jede Parametrisierung kann für die Nichtlinearitäten verwendet werden, aber wir betrachten tiefe neuronale Netzwerke (2.1.4.7). Dadurch erhalten wir eine nichtlineare Störung eines Hodge-Laplacian-Problems in gemischter Form wie folgt:

$$\mathbf{w}_{k-1} = d_{k-1}^* \mathbf{u}_k + \epsilon \mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{u}_k; \xi) \quad (3.2.3)$$

$$d_{k-1} \mathbf{w}_{k-1} + d_k^* d_k \mathbf{u}_k = \mathbf{f}_k, \quad (3.2.4)$$

wobei $\mathcal{NN} : \mathbb{R}^{\dim(C_{k-1})} \rightarrow \mathbb{R}^{\dim(C_{k-1})}$ einen Vektor von $\dim(C_{k-1})$ neuronalen Netzwrken bezeichnet, die einen Black-Box-verallgemeinerten Fluss parametrisieren. Dbeoi kann der Parameter

ϵ nur den Wert 1 oder 0 annehmen, je nachdem, ob die Nichtlinearität einbezogen ist oder nicht. Damit lautet die entsprechende Urform

$$\Delta_k \mathbf{u}_k + \epsilon d_{k-1} \circ \mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{u}_k; \xi) = \mathbf{f}_k. \quad (3.2.5)$$

Beispiel 3.2.4 Für $k = 2$ in \mathbb{R}^2 haben wir

$$\begin{aligned} \text{DIV} \circ \text{GRAD}^* \mathbf{u}_0 + \epsilon \text{DIV} \circ \mathcal{NN}(\text{GRAD}^* \mathbf{u}_0; \xi) &= \mathbf{f}_0 \\ \Delta_0 \mathbf{u}_2 + \epsilon \text{DIV} \circ \mathcal{NN}(\text{GRAD}^* \mathbf{u}_0; \xi) &= \mathbf{f}_0 \end{aligned}$$

und für $k = 1$

$$\begin{aligned} \text{GRAD}^* \circ \text{DIV} \mathbf{u}_1 + \text{CURL} \circ \text{CURL}^* \mathbf{u}_1 + \epsilon \text{CURL} \circ \mathcal{NN}(\text{CURL}^* \mathbf{u}_1; \xi) &= \mathbf{f}_1 \\ \Delta_1 \mathbf{u}_1 + \epsilon \text{CURL} \circ \mathcal{NN}(\text{CURL}^* \mathbf{u}_1; \xi) &= \mathbf{f}_1. \end{aligned}$$

3.3 Wohlgestelltheit

Als Nächstes untersuchen wir die **Wohlgestelltheit** des gestörten Hodge-Laplacian-Problems (3.2.3)-(3.2.4).

Definition 3.3.1 Die **schwache** Form von (3.2.5) ist im Raum $\mathbb{V} = C^k / \ker(\delta_k)$ wie folgt definiert:

$$a(\mathbf{u}_k, \mathbf{v}) + \epsilon \langle \mathcal{NN}(d_k^* \mathbf{u}_k), d_k^* \mathbf{v} \rangle_{k-1} = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_k, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}, \quad (3.3.1)$$

wobei

$$a(\mathbf{u}, \mathbf{v}) := \langle d_k^* \mathbf{u}, d_k^* \mathbf{v} \rangle_{k-1} + \langle d_k \mathbf{u}, d_k \mathbf{v} \rangle_{k+1}, \quad \forall \mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{V},$$

mit der zugehörigen Norm $\|\mathbf{u}\|_a := \sqrt{a(\mathbf{u}, \mathbf{u})} = \|\|d_{k-1}^* \mathbf{u}\|\|_{k-1} + \|\|d_k \mathbf{u}\|\|_{k+1}$.

Bemerkung 3.3.2 Wir nehmen die **Lipschitz**-Stetigkeit der nichtlinearen Störung an, d.h., dass es eine Konstante $L_N > 0$ gibt, so dass

$$\begin{aligned} \|\| \mathcal{NN}(\mathbf{v}_{k-1}) - \mathcal{NN}(\mathbf{w}_{k-1}) \|\|_{k-1} \\ \leq L_N \|\|\mathbf{v}_{k-1} - \mathbf{w}_{k-1}\|\|_{k-1}, \quad \forall \mathbf{v}_{k-1}, \mathbf{w}_{k-1} \in C^{k-1}. \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Außerdem nehmen wir Zur Reduzierung der nichtlinearen Störung auf einen linearen Gradientenabschluss im Grenzwert beim kleinen Gradient auch an, dass

$$\mathcal{NN} = 0 \quad (3.3.3)$$

Definition 3.3.3 Wir definieren $T : \mathbb{V} \mapsto \mathbb{V}$ so, dass für jedes $\mathbf{w} \in \mathbb{V}$, $\tilde{\mathbf{u}} := T(\mathbf{w}) \in \mathbb{V}$ die Lösung

des folgenden linearen Problems ist:

$$a(\tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{v}) + \epsilon \langle \mathcal{NN}(d_k^* \mathbf{w}), d_k^* \mathbf{v} \rangle_{k-1} = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_k, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}.$$

Bemerkung 3.3.4 Die Abbildung T ist offensichtlich **stetig** und daher kompakt im endlichdimensionalen Raum \mathbb{V} . Die Lösbarkeit von (3.3.1) ist somit äquivalent zur Lösbarkeit der Gleichung $\mathbf{u}_k = T(\mathbf{u}_k)$ in \mathbb{V} , was ein Fixpunktproblem darstellt. Wenn $\lambda > 0$ und \mathbf{w} die Gleichung $T(\mathbf{w}) = \lambda \mathbf{w}$ erfüllt, dann gilt

$$\lambda a(\mathbf{w}, \mathbf{v}) + \epsilon \langle \mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{w}), d_k^* \mathbf{v} \rangle_{k-1} = \langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_k, \quad \forall \mathbf{v} \in \mathbb{V}.$$

Durch die Wahl $\mathbf{v} = \mathbf{w}$ erhalten wir

$$\begin{aligned} \lambda \|\mathbf{w}\|_a^2 &\leq \langle \mathbf{f} - a\mathbf{w} \rangle_a + \epsilon \|\mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{w})\|_{k-1} \|d_{k-1}^* \mathbf{w}\|_{k-1} \\ &\leq \underbrace{\|\mathbf{f}\|_{-a}}_{\sup_{\mathbf{v} \in \mathbb{V}} \frac{\langle \mathbf{f}, \mathbf{v} \rangle_k}{\|\mathbf{v}\|_a}} \|\mathbf{w}\|_a + \epsilon \|\mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{w})\|_{k-1} \|d_{k-1}^* \mathbf{w}\|_{k-1} \end{aligned}$$

Mit der Lipschitz-Stetigkeitsannahme (3.3.2) und der Annahme (3.3.3) ergibt sich

$$\begin{aligned} \|\mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{w})\|_{k-1} &= \|\mathcal{NN}(d_{k-1}^* \mathbf{w}) - \mathcal{NN}(0)\|_{k-1} \\ &\leq L_N \|d_{k-1}^* \mathbf{w}\|_{k-1} \underbrace{\leq}_{\|d_{k-1}^* \mathbf{w}\|_{k-1} \leq \|\mathbf{w}\|_a} L_N \|\mathbf{w}\|_a \end{aligned}$$

Die beiden letzten Ungleichungen liefern

$$\lambda \|\mathbf{w}\|_a^2 \leq (\|\mathbf{f}\|_a + \epsilon L_N \|\mathbf{w}\|_a) \|\mathbf{w}\|_a$$

und damit

$$\lambda \leq \frac{\|\mathbf{f}\|_a + \epsilon L_N \|\mathbf{w}\|_a}{\|\mathbf{w}\|_a}.$$

Bemerkung 3.3.5 Mit der letzten Ungleichung gilt $\lambda < 1$ für jedes \mathbf{w} auf dem Rand des Balls (siehe auch Definition 2.2.1) in \mathbb{V} mit Radius

$$\rho \geq \frac{\|\mathbf{f}\|_{-a}}{(1 - \epsilon L_N)}.$$

Aus der Kontraposition von (2.2.8) folgt, dass es für die Abbildung T (3.3.3) einen Fixpunkt in jedem Ball mit Radius $\rho \geq \frac{\|\mathbf{f}\|_a}{1 - \epsilon L_N}$ als Lösung der Gleichung (3.3.1) existiert.

Satz 3.3.6 Seien (3.3.2) und (3.3.3). Wenn $\epsilon L_N < 1$, hat die Gleichung (3.3.1) eine **eindeutige** Lösung $\mathbf{u}_k \in \mathbf{V}$, die erfüllt

$$\|\mathbf{u}_k\|_a \leq \frac{\|\mathbf{f}\|_a}{(1 - \epsilon L_N)}. \quad (3.3.4)$$

Beweis. Der Existenz der Lösung wurde bereits unter Bemerkungen 3.3.4 und 3.3.5 diskutiert. Sei \mathbf{u}_k

die Lösung und $\mathbf{v} = \mathbf{u}_k$ in der (3.3.1); dann haben wir

$$\|\mathbf{u}_k\|_a^2 \leq (\|\mathbf{f}\|_a + \epsilon L_N \|\mathbf{u}_k\|_a) \|\mathbf{u}_k\|_a.$$

Damit ergibt sich (3.3.4).

Zum Beweis der Eindeutigkeit der Lösung von (3.3.1) nehmen wir an, dass \mathbf{u}_k und $\bar{\mathbf{u}}_k$ zwei verschiedene Lösungen von (3.3.1). Mit $\mathbf{e} = \mathbf{u}_k - \bar{\mathbf{u}}_k$ haben wir

$$a(\mathbf{e}, \mathbf{v}) + \epsilon \langle \mathcal{NN}(\delta_{k-1}^* \mathbf{u}_k), \delta_{k-1}^* \mathbf{v}_{k-1} \rangle - \epsilon \langle \mathcal{NN}(\delta_{k-1}^* \bar{\mathbf{u}}_k), \delta_{k-1}^* \mathbf{v}_{k-1} \rangle = 0.$$

Beim Setzen $\mathbf{v} = \mathbf{e}$ und durch die Lipschitz-Stetigkeit (3.3.2) erhalten wir

$$\|\mathbf{e}\|_a^2 \leq \epsilon L_N \|\delta_{k-1}^* \mathbf{e}\|_{k-1}^2 \leq \epsilon L_N \|\mathbf{e}\|_a^2,$$

was zum Widerspruch mit $\epsilon L_N < 1$ führt und damit ist der Beweis fertig. \square

Bemerkung 3.3.7 In unserer Implementierung betrachten wir ein komponentenweise definiertes neuronales Netz, das die folgende Struktur hat:

$$\mathcal{NN}(\mathbf{x}) := \begin{pmatrix} \mathcal{NN}_1(x_1) \\ \vdots \\ \mathcal{NN}_n(x_n) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{NN}^i(x_i) = \psi_{L_i}^i \circ T_{L_i}^i \circ \dots \circ \psi_1^i \circ T_1^i(x_i),$$

wobei $T_\ell^i(x_\ell^i) := \mathbf{M}_\ell^i x_\ell^i + \mathbf{b}_\ell^i$ eine affine Funktion (2.5.3.8) und ψ_ℓ^i eine nichtlineare Aktivierungsfunktion (2.1.4.5) ist. Bei der **Annahme** ψ_ℓ^i c_ℓ^i -Lipschitz-nichtlineare Funktionen (z.B. Sigmoid 1-Lipschitz-Funktionen) und der Definition $(\mathcal{N}_\ell^i(x_i)) := T_\ell^i \circ \psi_{\ell-1}^i \circ \dots \circ \psi_1^i \circ T_1^i(x_i)$, kann die Lipschitz-Konstante L_N (3.3.2) von **NN** wie folgt abgeschätzt werden,

$$\begin{aligned} L_N &\leq \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\nabla \mathcal{NN}(\mathbf{x})\|_{k-1} = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \sup_{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n} \frac{\|[\nabla \mathcal{NN}(\mathbf{x})]\mathbf{y}\|_{k-1}}{\|\mathbf{y}\|_{k-1}} \\ &= \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \|\nabla \mathcal{NN}(\mathbf{x})\| = \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \left\| \text{diag} \left(\frac{d\mathcal{NN}^1(x_1)}{dx_1}, \dots, \frac{d\mathcal{NN}^n(x_n)}{dx_n} \right) \right\| \\ &\leq \max_i \left(\sup_{x_i \in \mathbb{R}} \left\| \text{diag}((\psi_L^i)'(\mathcal{N}_L^i(x_i))) \mathbf{M}_L^i \cdots \mathbf{M}_2^i \text{diag}((\psi_1^i)'(\mathcal{N}_1^i(x_i))) \mathbf{M}_1^i \right\| \right) \\ &\leq \max_i \left(\prod_{\ell=1}^{L_i} c_\ell^i \|\mathbf{M}_\ell^i\| \right) \end{aligned}$$

Daher wird bei der Wahl $\left[\max_i \left(\prod_{\ell=1}^{L_i} c_\ell^i \|\mathbf{M}_\ell^i\| \right) \right]^{-1}$ die **Annahme** erfüllt.

3.4 Konstruktion von Kettenkomplexe

Das vorgestellte Modell im letzten Abschnitt basiert auf einem entsprechenden Graphen, auf den der **DDEC**[‡] angewendet wird. Für die Surrogatmodellierung wird angenommen, dass ein sehr feines polygonales Netz und eine hochauflösende Lösung der partiellen Differentialgleichung (PDE) verfügbar sind. Es wird gezeigt, wie eine Vergrößerung (en. Coarsening) des feinen Netzes eine Struktur bewahrt, die eine einfache Implementierung ermöglicht. Hierbei werden Graph-Cut-Vergrößerungen betrachtet, die die Domäne Ω in N_c disjunkte Volumensubdomänen partitionieren. Hierbei werden Graph-Cut-Vergrößerungen betrachtet, die die Domäne Ω in N_c disjunkte Volumensubdomänen partitionieren. In der (**Abbildung 3.1**) eine Vergrößerungsprozess dargestellt. Der Prozess geht von einem fine-Netz aus, das in d-Zellen diskretisiert, partitioniert diese in disjunkte diese in disjunkte Unterdomänen und nutzt das feine Netz, um vergrößerte k -Zellen (2.5.3.7) und Korandoperatoren ∂_k (2.6.3.1) mit konsistenter Orientierung abzuleiten. Die Werte auf den vergrößerten k -Zellen entsprechen den Summen der einzelnen Feinmaschigen Momente mit korrekter Berücksichtigung der Orientierung. Im oberen Teil der Abbildung wurde ein Fünf 2-Zellen zu einem Paar von 2-Zellen vergrößert. Im unteren Teil des Bildes ist eine repräsentative Vergrößerung eines kartesischen Netzes dargestellt.

Bemerkung 3.4.1 Dies ist eine spezifische Konstruktion für synthetische Daten, die die Verfügbarkeiten von Adjazenzmatrizen (2.7.7) eines feinen Netzes ausnutzt. Es wird betont, dass die Rechnung auf jedem angemessen definierten Graph angewendet werden kann. Zudem führt die hier angenommene Graph-Cut-Vergrößerung zu einer quasi-uniformen Partitionierung des Raums, die die Daten nicht berücksichtigt.

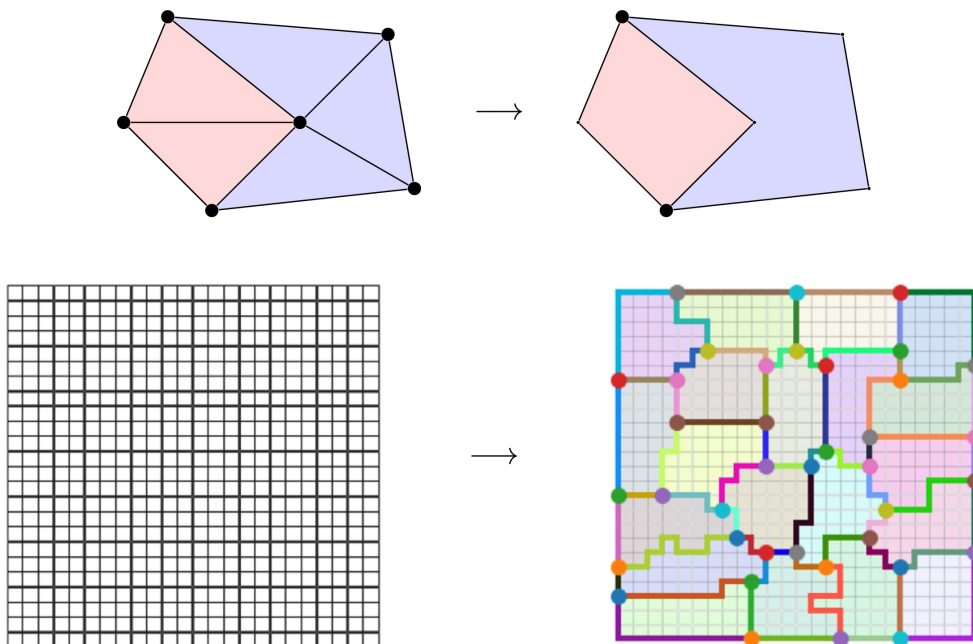


Abbildung 3.1: Der Vergrößerungsprozess eines feinen Netzes

[‡] Das **DDEC** leitet sich vom englischen Ausdruck **Data-Driven Exterior Calculus** auf Deutsch datengetriebene äußere Rechnung ab.

Bemerkung 3.4.2 Wir nehmen an, dass die hochauflösende Lösung mit einem d -dimensionalen Kettenkomplex assoziiert ist, wobei k -Zellen durch F_k für $k < d$ bezeichnet werden und $\partial_k^{\text{fine}} : F_{k+1} \rightarrow F_k$ wie in der Definition 2.5.5 beschrieben ist und der Korand (2.6.3.1) $\delta_k^{\text{fine}} : F^k \rightarrow F^{k+1}$ über die allgemein in Netzdatenstrukturen verfügbaren Adjazenzmatrizen kodiert ist. Hier verwenden wir das Symbol F und den Superskript fine zur Bezeichnung von feinmaschigen Objekten. Unser **Ziel** ist es, einen groben Komplex zu konstruieren, der durch das Symbol C bezeichnet wird und im DDEC-Rahmen verwendet werden kann, wie in den Abschnitten 3.1, 3.2 und 3.3 diskutiert. Die Konstruktion umfasst zwei Schritte. Zunächst vergrößern wir die Feinmaschigen Menge der k -Kette F_k , um die grobe Menge der k -Kette C_k zu erhalten. Dies kann induktiv durch Vergrößerung der d -Zellen begonnen werden. Dann definieren wir die groben Rand- und Korandoperatoren, indem wir den feinen und groben Komplex richtig miteinander in Beziehung setzen.

Bemerkung 3.4.3 Um C_k induktiv aus F_k zu definieren, beginnen wir mit der Vergrößerung der d -Zellen. Gegeben sei eine Partitionierung der N_f d -Zellen in N_c disjunkte, verbundene Untergruppen, bezeichnet durch $F_d = \bigsqcup_{i=1}^{N_c} P_i$. Wir definieren den Raum der groben d -Kette C_d als einen Unterraum von F_d basierend auf der Partition $\{P_i\}_{i=1}^{N_c}$ mit der folgenden natürlichen Inklusion (2.5.20):

$$\iota_d \in \mathbb{R}^{N_f \times N_c}, \quad (\iota_d)_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{falls } f_i \in P_j, \\ 0 & \text{falls } f_i \notin P_j. \end{cases} \quad (3.4.1)$$

Dies hat ein duales C_d , das als ein Unterraum von F^d identifiziert wird. Betrachten wir nun das Bild von C_d unter ∂_d^{fine} , bestehend aus den feinen d -Ketten, die an den Partitions Grenzen liegen. Wir definieren das Element $c_{ij} := P_i \cap P_j$ (konsistent orientiert) für $i, j = 1, 2, \dots, N_c$ und deren Spanne als die groben $(d-1)$ -Ketten C_{d-1} . Dann können wir induktiv fortfahren. Mit den Ketten- und Kokettenräumen (3.1.2), die durch $d-k$ indiziert sind, betrachten wir das Bild von C_{d-k} unter der Abbildung $\partial_{d-k-1}^{\text{fine}}$. Dies besteht aus den $(d-k-1)$ -Schnittstellen zwischen den groben $d-k$ -Ketten. Wir definieren das Element $C_{i_1 \dots i_{d-k-1}} = \bigcap_{\ell=i_1}^{i_{d-k-1}} P_\ell$.

Bemerkung 3.4.4 Es kann vorkommen, dass $c_{i_1 i_2 \dots i_{d-k-1}}$ disjunkt ist. Als Implementierungsdetail kann jede der verbundenen Komponenten als separate Kette betrachtet werden, oder ihre disjunkte Vereinigung kann als eine einzelne Kette betrachtet werden. Diese Wahl beeinflusst die Behandlung paralleler Flüsse zwischen Partitionen entweder als Summe einzelner unterschiedlicher Flüsse zwischen den Partitionen oder als Summe dieser Flüsse als eine einzige effektive Größe zwischen den Partitionen.

- **Konstruktion von Ketten und Koketten:** Durch Konstruktion gilt $C_k \subset F_k$ für $k = 0, \dots, d$. Daher gibt es eine natürliche Inklusion (3.4.1) $\iota_k : C_k \mapsto F_k$, deren Einträge je nach Partition und **Orientierung** 1, -1 oder 0 sind (2.7.30). Außerdem gilt $C^k \subset F^k$ und die entsprechenden natürlichen Inklusionen sind definiert als $\iota_k := \iota_{d-k}$ für $k = 0, \dots, d$.
- **Aufbau von Rand- und Korand-Operatoren:** Um die groben Rand- und Korand-Operatoren zu definieren, die C_k und C^k verbinden, definieren wir zunächst die linearen Projektionen

$\pi_k : F_k \mapsto C_k$ als

$$\pi_k = (\iota_k^T \iota_k)^{-1} \iota_k^T, \quad (3.4.2)$$

und $\pi^k : F^k \mapsto C^k$

$$\pi^k = \left((\iota^k)^T \iota^k \right)^{-1} (\iota^k)^T. \quad (3.4.3)$$

Es ist zu beachten, dass wegen $\iota_k = \iota_{d-k}$, $\pi_k = \pi_{d-k}$. Damit definieren wir die groben Rand-Operatoren (2.5.3.11) wie folgt:

$$\partial_k := \pi_k \cdot \partial_k^{\text{fine}} \cdot \iota_{k+1},$$

und die groben Korand-Operatoren (2.6.3.1)

$$\delta_k := \pi^{k+1} \cdot \delta_k^{\text{fine}} \cdot \iota^k.$$

Bemerkung 3.4.5 Die linearen Projektionen π_k und $\pi^k := \pi_k^*$ sind kleinsten Quadrate-Projektionen. Da die natürlichen Inklusionen ι_k und $\iota^k := \iota_k^*$ auf Partitionen basieren, sind $\iota_k^T \iota_k$ und $(\iota^k)^T \iota^k$ Diagonalmatrizen mit diagonalen Einträgen, die der Anzahl der k -Ketten (2.5.3.10) in der zugehörigen Partition entsprechen. Daher kann in einer praktischen Umsetzung einfach $\pi_k = \iota_k^T$ und $\pi_k^* = (\iota_k)^T$ verwendet werden, und ng einfach $\pi_k = \iota_k^T$ und $\pi_k^* = (\iota_k)^T$ verwenden, und aufgrund der Definition (3.1.1) werden $(\iota_k^T \iota_k)^{-1}$ und $((\iota^k)^T \iota^k)^{-1}$ implizit in \mathbf{B}_k und \mathbf{D}_k übernommen. Zusammengefasst, im Falle von $d = 2$, sind alle diskutierten Räume durch das folgende kommutative Diagramm (3.4.4) verknüpft.

$$\begin{array}{ccccccc}
 0 & \xrightarrow{\quad} & F^0 & \xrightarrow{\delta_0^{\text{fine}}} & F^1 & \xrightarrow{\delta_1^{\text{fine}}} & F^2 \xrightarrow{\quad} 0 \\
 & \nearrow \iota^0 & \downarrow \pi^0 & & \nearrow \iota^1 & \downarrow \pi^1 & \nearrow \iota^2 \\
 0 & \xrightarrow{\quad} & C^0 & \xrightarrow{\delta_0} & C^1 & \xrightarrow{\delta_1} & C^2 \xrightarrow{\quad} 0 \\
 & \downarrow \iota_0 & \downarrow \pi_0 & \xleftarrow{\partial_0^{\text{fine}}} & \downarrow \iota_1 & \downarrow \pi_1 & \downarrow \iota_2 \\
 0 & \xleftarrow{\quad} & F_0 & \xleftarrow{\partial_0^{\text{fine}}} & F_1 & \xleftarrow{\partial_1^{\text{fine}}} & F_2 \xleftarrow{\quad} 0 \\
 & \downarrow \iota_0 & \downarrow \pi_0 & & \downarrow \iota_1 & \downarrow \pi_1 & \downarrow \iota_2 \\
 0 & \xleftarrow{\quad} & C_0 & \xleftarrow{\partial_0} & C_1 & \xleftarrow{\partial_1} & C_2 \xleftarrow{\quad} 0
 \end{array} \quad (3.4.4)$$

Die oberste vordere Zeile dieses Diagramms entspricht der mittleren Zeile des Kettenkomplexes (3.1.4). Der DDEC-Komplex ergibt sich aus der Störung dieser Operatoren wie (3.1.1)

3.5 PDE-abhängige Optimierung

Angenommen, dass Zugang zu Daten durch den Vergrößerungsprozess des vorherigen Abschnitts (3.4) besteht und durch \mathbf{X}_{data} ein Vektor bezeichnet wird, der die vergrößerten \mathbf{w}_{k+1} (Fluss (2.2.5)) und \mathbf{u}_k (Potenzial (2.2.28)) Freiheitsgrade zusammenfasst. Es kann nur möglicherweise partielle Daten gegeben werden, d.h. Beobachtungen von möglicherweise einem einzigen Feld w_{k+1} oder

\mathbf{u}_k , oder Beobachtungen auf einer Teilmenge des Kettenkomplexes. Das Randwertproblem in (3.2.5) wird dann durch den nichtlinearen Operator $\mathcal{L}_\xi[\mathbf{X}] = \mathbf{f}$ ausgedrückt, wobei alle Modellparameter in ξ (d.h. \mathbf{B}_k , \mathbf{D}_k und Gewichte und Verschiebungen (en. Biases) des neuronalen Netzwerks (2.1.4.8)) zusammengefasst sind.

- **Lösung des Optimierungsproblems:** Es wird eine Lösung für das folgende quadratische Programm mit nichtlinearen Gleichheitsbeschränkungen (auch Nebenbedingungen genannt) gesucht:

$$\min_{X, \xi} \|X - X_{\text{data}}\|^2 \quad \text{s.t.} \quad \mathcal{L}_\xi[\mathbf{X}] = \mathbf{f}, \quad (3.5.1)$$

wobei $\|\cdot\|$ die ℓ_2 -**Norm**[§] bezeichnet. Um die Gleichheitsbeschränkung zu vermeiden, könnte man einen einzelnen skalaren Strafparameter λ einführen und einen Gradientenabstiegs-Optimierer (2.3.2) zur Lösung verwenden:

$$\min_{\xi} \|X - X_{\text{data}}\|^2 + \lambda \|\mathcal{L}_\xi[X] - f\|^2.$$

- **Lagrange-Multiplikatoren:** Bei der Einführung der Lagrange-Multiplikatoren λ (2.3.1.5) wird die Gleichheitsbeschränkung wie folgt durchgesetzt

$$\min_{\xi, \mathbf{X}, \lambda} L_\xi(X, \lambda) \quad \text{s.t.} \quad \mathcal{L}_\xi[X] = \mathbf{f}, \quad (3.5.2)$$

$$\text{Wobei} \quad L_\xi(\mathbf{X}, \lambda) = \|\mathbf{X} - \mathbf{X}_{\text{data}}\|^2 + \lambda^\top (\mathcal{L}_\xi[\mathbf{X}] - \mathbf{f}). \quad (3.5.3)$$

Dies realisiert ein Karush-Kuhn Tucker Bedingungen nach der $\nabla L_\xi(\mathbf{X}, \lambda) = 0$ (2.3.1.8). Daraus ergeben sich drei notwendige Bedingungen für einen Minimierer, die iterativ gelöst werden:

- **Vorwärtsproblem:** $\partial_\lambda L_\xi(\mathbf{X}, \lambda) = 0$, löst das Vorwärtsproblem $\mathcal{L}_\xi[\mathbf{X}] = f$. Bei festem ξ wird dies mit der Newton-Raphson-Methode (2.3.3) gelöst, wobei die Jacobi-Matrix \mathcal{L}_ξ , $J_{\xi, \mathbf{X}}$ (2.2.24) berechnet wird. Dies ist lösbar, wenn $\epsilon L_n < 1$ (2.3.16).
- **Adjungiertes Problem:** $\partial_{\mathbf{X}} L_\xi(\mathbf{X}, \lambda) = 0$ ergibt das adjungierte Problem $J_{\xi, \mathbf{X}}^\top \lambda = -2(\mathbf{X} - \mathbf{X}_{\text{data}})$ (3.5.3). Die Jakobische Matrix ist nach Lösung des Vorwärtsproblems verfügbar.
- **Modellaktualisierung:** $\partial_\xi L_\xi(X, \lambda) = 0$ kann wegen der neuronalen Netzwerke in (3.2.5) nicht mit Optimierern zweiter Ordnung (2.3.20) gelöst werden. Daher wird ein Gradientenoptimierer erster Ordnung verwendet, um bei jeder Iteration eine kleine Modellstörung vorzunehmen (**Abbildung 3.2**)

- **Training mit mehreren Lösungen:** Da die angenommene Modellform nichtlinear ist, ist es notwendig, gleichzeitig auf einer Vielzahl von Randbedingungen zu trainieren, um die nichtlineare Reaktion über einen Bereich von Bedingungen zu lernen - wir müssen daher mehrere

[§] Für einen Vektor $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ in \mathbb{R}^n ist die ℓ_2 -Norm definiert durch

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}.$$

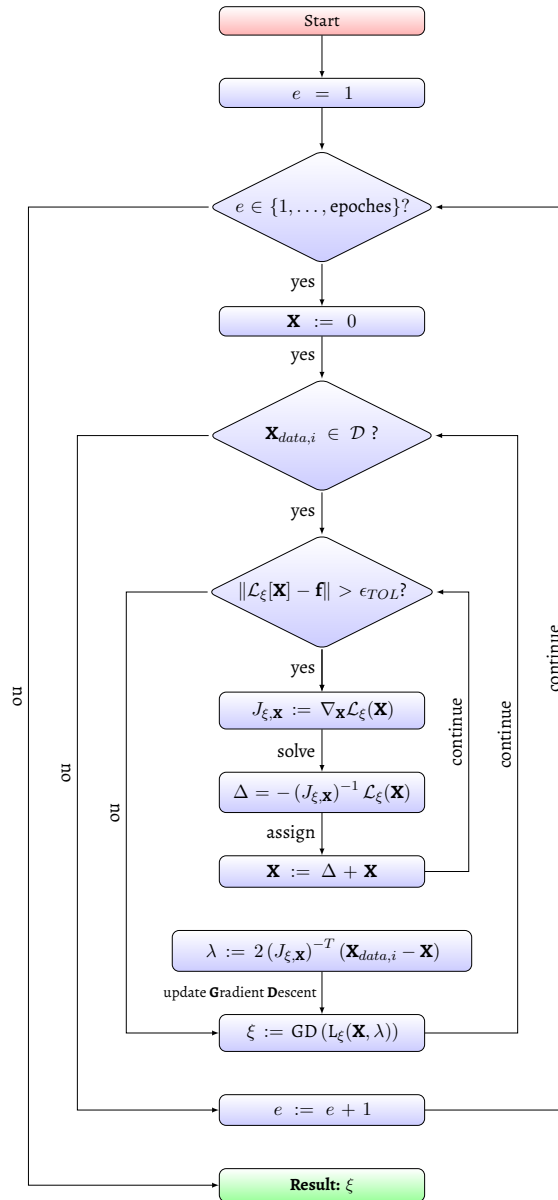


Abbildung 3.2: Ein Gradientenabstiegs-Update zur Verlustminimierung

Lösungen des nichtlinearen Problems gleichzeitig aufnehmen. Mit diesem im Hinterkopf wird in Algorithmus 1 eine Batch-Training-Strategie (2.1.1.1) für den Umgang mit Trainingsdaten $D = \{\mathbf{X}_{\text{data},i}\}_{i=1}^{N_{\text{batches}}}$ vorgestellt, die aus N_{batches} Lösungen besteht.

- **Regularisierung:** Bei der Anpassung eines Modells an ein System, das durch eine lineare PDE geregelt wird, ist es wünschenswert, eine einfache Darstellung zu erhalten, die die metrische Information in $a(\mathbf{u}, \mathbf{v})$ (3.3.1) lernt, während der Beitrag von \mathcal{NN} auf Null gesetzt wird. Während man dies direkt durch Setzen von $\epsilon = 0$ durchsetzen kann, schlagen wir einen Regularisierer vor, um nichtlineare Terme nur dann einzubeziehen, wenn dies notwendig ist. In Anbetracht von Bemerkung 3.3.7, unter der Annahme, dass 1-Lipschitz-Aktivierungsfunktionen (2.1.4.5) verwendet werden, kann man die Größe der Lipschitz-Konstante relativ zur **Poincaré**-Ungleichung

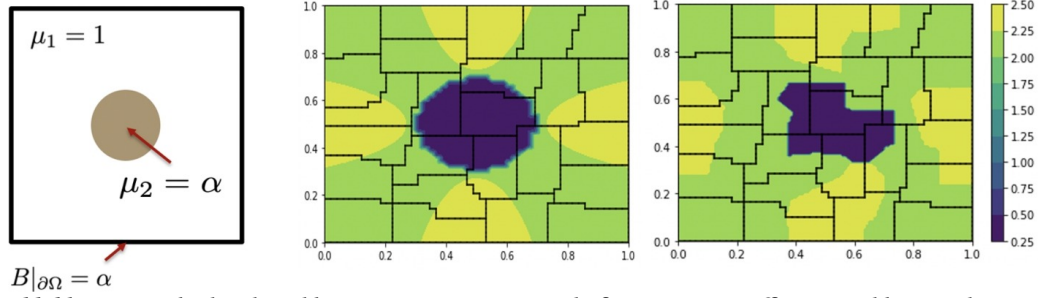


Abbildung 3.3: Zylindrische Inklusion (in einem 2D-Bereich) für stationäre Diffusionsprobleme in der Magnetostatik (2.2.1.16)

(3.1.9) indirekt steuern, indem man die Regularisierung der Gleichung (3.5.2) einführt:

$$L_{\xi}(X, \lambda) + \epsilon_L \left(\sum_{i=1}^{L_i} \|M_{\ell}^i\| \right)^2, \quad (3.5.4)$$

wobei $\epsilon_L > 0$ ein Strafterm ist, der kalibriert werden muss, und $\|M_{\ell}^i\|$ die 2-Norm (3.5.1) der Gewichte in der ℓ -ten Schicht des i -ten neuronalen Netzwerks bezeichnet. Die Einführung des Regularisierers ändert die Vorwärts- oder Rückwärtslösungen während des Trainings nicht.

Bemerkung 3.5.1 Es gibt mehrere Methode zur Initialisierung der Gewichte in einem neuronalen Netzwerk. Diese Methoden werden oft als **Initializer** bezeichnet. Die Wahl eines Initializers hängt von mehreren Faktoren wie die Art der Aktivierungsfunktion, Tiefe des Netzwerks und vielen anderen ab. Angesicht unseres Optimierungsproblem ist die Wahl einer Initialisierungsmethode, die dazu beiträgt, das problem des verschwindenden oder explodierenden **Gradienten** zu vermeiden, besonders wichtig.

3.6 Numerische Ergebnisse

Im Folgenden präsentieren wir Ergebnisse für zwei kanonische $H(\text{div})$ - und $H(\text{curl})$ -Probleme aus der **Magnetostatik** (siehe auch Abschnitt 2.2.1). Dort betrachten wir eine zylindrische Inklusion mit Radius a , die innerhalb des Einheitsquadrats mit dem Mittelpunkt im Ursprung eingebettet ist. Die Materialeigenschaften werden wie folgt vorgegeben.

$$\mu_{\alpha}(x) = \begin{cases} \alpha & \text{falls } \|\mathbf{x}\| < a \\ 1 & \text{sonst} \end{cases}.$$

Die Behandlung der Materialgrenze ist beim $\|x\| = a$ ohne die Einführung von Oszillationen (siehe linke Seite der **Abbildung 3.3**) ein Markenzeichen mimetischer Diskretisierungen auf auftretbar unerwünschte Schwankungen in numerische Berechnungen und resultiert aus der exakten Behandlung der Grenzbedingungen mittels des Satzes von Stokes, nämlich, dass der Sprung im Fluss über eine Grenze null ist (2.6.2.12).

Für unseres **Problem** setzen wir Randbedingungen durch Identifikation geeigneter Koketten (3.4.4) an der Grenze um, indem wir die entsprechenden Zeilen der Jacobi-Matrix (2.2.24) durch Nullen ersetzen, eine Eins auf der Diagonale setzen und den gewünschten Wert auf der rechten Seite festlegen (Vorwärtsproblem).

Bemerkung 3.6.1 Die Parametrisierung nichtlinearer Flüsse erfordert die Spezifikation der Aktivierungsfunktion (3.5.4) und der Netzwerkbreite/-tiefe (3.2.3). Dabei werden kleine Mehrschicht-Perzeptron-Netzwerke mit $O(10)$ Parametern und variierenden Aktivierungsfunktionen (2.1.4.6), verwendet, um die Robustheit gegenüber architektonischen Hyperparametern (2.1.4.10) hervorzuheben.

Bemerkung 3.6.2 Die versteckten Schichten des Netzwerks werden mit dem He-Initializer (3.5.1) initialisiert, die abschließende lineare Schicht auf null initialisiert wird, und die Minimierung mit **Adam** (2.3.4.6) durchgeführt wird. Als einzige Hyperparameter wird die Lernrate (2.1.4.10) in Adam mit einem Anfangswert von 0,01 kalibriert und bis ein gut erzielt Ergebnis wird sie weiter reduziert. Dabei werden die Trainingsdaten durch eine hochauflösende DEC-Diskretisierung (siehe den Abschnitt 3.1) auf einem Gitter von 50^2 (50×50) Zellen generiert. Die Genauigkeit des Ergebnisses wird durch RMS der Koketten (2.1.7) angegeben.

Beispiel 3.6.3 (Magnetostatikproblem) Wir betrachten als Trainingsdaten Lösungen des Gleichungssystems

$$\nabla \times \mathbf{J} = \mathbf{f} \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.2.40)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.2.44)$$

$$\mathbf{B} = \mu_\alpha \mathbf{J} \quad \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.2.48)(2.2.1.9)$$

$$\mathbf{B} \cdot \hat{n} = g \quad \mathbf{x} \in \partial\Omega \quad (2.2.1.5)$$

Für dieses 2D-Problem kann das Magnetfeld mit einem Skalar identifiziert werden, nämlich $\mathbf{B} = (0, 0, B(x, y))$. Randbedingungen werden auf den 0-Koketten (3.0.1)(3.4.4), die den Fluss (2.2.1.3) von \mathbf{B} durch Unterdomänen-Grenzen kodieren (3.1.2), und 1-Koketten, die das magnetische Potential (3.2.2) an der Grenze auf Null setzen, festgelegt. Für dieses Problem betrachten wir nur die nichtlineare Verallgemeinerungsfall, bei dem horizontale Fluss mit dem Diffusionsparameter skaliert und das Material bei steigendem Fluss leitfähiger wird. Wir setzen dazu $f = 0$ und $g = \alpha$, um ein nichtlineares Material zu erhalten, dessen Permittivität mit der Stärke des angelegten Magnetfeldes zunimmt (**Abbildung 3.4**). Wir setzen $N_{\text{data}} = 4$ und wählen μ gleichmäßig aus $\{1, 10\}$. Das resultierende Modell ist in der Lage, verschiedene Werte von α und die daraus resultierende **Unstetigkeit** im Magnetfeld zu rekonstruieren [THH22].

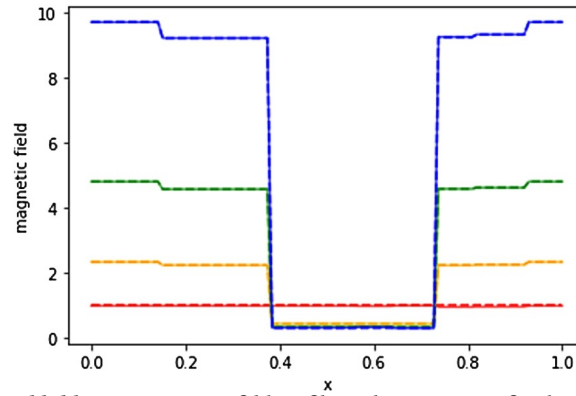


Abbildung 3.4: Magnetfeldprofile entlang $y = 0,5$ für das Magnetostatik-Problem, das trainierte Modell (gestrichelt) vs. exakte Lösung (durchgezogen) mit 25 Unterdomänen, Lernrate (2.1.4.10) 10^{-4} und einlagigem Netzwerk mit parametrischer ReLU-Aktivierung (2.1.4.5).

Bemerkung 3.6.4 (Unstetigkeit im Magnetfeld) Eine Diskontinuität/Unstetigkeit im magnetischen Feld tritt an Grenzflächen zwischen Materialien mit unterschiedlichen magnetischen Eigenschaften auf. Diese plötzliche Änderung des Magnetfeldes entsteht durch Unterschiede in der Magnetisierung oder Permeabilität der Materialien. Mathematisch zeigt sich dies in der Tangentialkomponente (2.3.2.3) des Magnetfeldes an der Grenzfläche, beschrieben durch $\vec{B}_{1,\text{tan}} - \vec{B}_{2,\text{tan}} = \mu_0 \vec{K}$, wobei μ_0 die magnetische Feldkonstante und \vec{K} die Oberflächenstromdichte (2.2.41) ist.

Anhang

In diesem Kapitel

4.1	Abbildungsverzeichnis	109
4.3	Abkürzungsverzeichnis	110
4.4	Literaturverzeichnis	111

finden Sie Listen aller Abbildungen, Abkürzungen und Referenzen, die in dieser Arbeit verwendet wurden, zusammen mit den entsprechenden Seitenzahlen.

4.1 Abbildungsverzeichnis

Abbildungen

2.1	Abbildung 2.1: Von links Unteranpassung, gute Anpassung und Überanpassung bei einem Datenmodell	7
2.2	Abbildung 2.2: Eine traditionelle Sicht auf neuronales Netzwerk.	12
2.3	Abbildung 2.3: Die Architektur eines neuronalen Netzwerks.	14
2.4	Abbildung 2.4: der skalare Fluss $\Phi = \mathbf{F} \cdot \mathbf{A} \cdot \cos(\theta) = \int \mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{n}} \, dA$	16
2.5	Abbildung 2.5: Ein magnetisches Feld \vec{B} erzeugt durch einen elektrischen Strom I	26
2.6	Abbildung 2.6: Zylindrischer Leiter mit Radius a	30
2.7	Abbildung 2.7: Die Niveaumenge der $f(x_1, x_2) = (x_1^2 + x_2 - 11)^2 + (x_1 + x_2^2 - 7)^2$	36
2.8	Abbildung 2.8: Ein dreidimensionaler Simplicialkomplex.	46
2.9	Abbildung 2.9: Eine homotopische Abbildung.	59
2.10	Abbildung 2.10: Eine berandete Hyperfläche mit dem Berandungspunkt P	67
2.11	Abbildung 2.11: Eine nicht orientierbare Mannigfaltigkeit σ und ihr Rand.	72
2.12	Abbildung 2.12: Der äußere Einheitsnormalenvektor $v(p)$	74
2.13	Abbildung 2.13: Ein isomorpher Graph und sein Komplement.	83
3.1	Abbildung 3.1: Der Vergrößerungsprozess eines feinen Netzes	100
3.2	Abbildung 3.2: Ein Gradientenabstiegs-Update zur Verlustminimierung	104
3.3	Abbildung 3.3: Zylindrische Inklusion (in einem 2D-Bereich) für stationäre Diffusionsprobleme in der Magnetostatik (2.2.1.16)	105
3.4	Abbildung 3.4: Magnetfeldprofile entlang $y = 0, 5$ für das Magnetostatik-Problem, das trainierte Modell (gestrichelt) vs. exakte Lösung (durchgezogen) mit 25 Unterdomänen, Lernrate (2.1.4.10) 10^{-4} und einlagigem Netzwerk mit parametrischer ReLU-Aktivierung (2.1.4.5).	107

4.3 Abkürzungsverzeichnis

Abkürzungen

<i>Adam</i>	Ad aptive M oment Estimation	42
<i>DDEC</i>	D ata- D riven E xterior C alculus	100
<i>DEC</i>	D iscrete E xterior C alculus	92
<i>ERM</i>	E mpirical R isk M inimization	7
<i>KKT</i>	K arush- K uhn- T ucker Bedingung	34
<i>OGS</i>	O rthogonalsystem	17
<i>ONB</i>	O rthonormal b asis	17
<i>ONS</i>	O rthonormalsystem	17
<i>NLR</i>	n ormierter linearer R aum	17
<i>PDE</i>	p artialPartial D ifferential E quation	4
<i>PHR</i>	P rä- H ilbertraum	16
<i>PL</i>	P olyak- Ł ojasiewicz	40
<i>RMSE</i>	R oot M ean S quar E rror	10
<i>SGD</i>	S tochastic G radient D escent	41

4.4 Literaturverzeichnis

Literatur

- [AE08a] Herbert Amann und Joachim Escher. „Die lokale Theorie der Differentialformen“. In: *Analysis III*. 2. Aufl. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008. Kap. XI.3, S. 294–296. DOI: 10.1007/978-3-7643-8884-3 (siehe S. 69).
- [AE08b] Herbert Amann und Joachim Escher. „Integration auf Mannigfaltigkeiten“. In: *Analysis III*. 2. Aufl. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008. Kap. XII.3, S. 442–444. DOI: 10.1007/978-3-7643-8884-3 (siehe S. 74).
- [AE08c] Herbert Amann und Joachim Escher. „Multilineare Algebra“. In: *Analysis III*. 2. Aufl. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008. Kap. XI.2, S. 282–283. DOI: 10.1007/978-3-7643-8884-3 (siehe S. 68).
- [AE08d] Herbert Amann und Joachim Escher. „Untermannigfaltigkeiten“. In: *Analysis III*. 2. Aufl. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008. Kap. XI.1, S. 257–260. DOI: 10.1007/978-3-7643-8884-3 (siehe S. 67).
- [AE08e] Herbert Amann und Joachim Escher. „Vektorfelder und Differentialformen“. In: *Analysis III*. 2. Aufl. Grundstudium Mathematik. Birkhäuser Basel, 2008. Kap. XI.4, S. 335–337. DOI: 10.1007/978-3-7643-8884-3 (siehe S. 74).
- [Bos23] Siegfried Bosch. „Elementare Gruppentheorie“. In: *Algebra*. 10. Aufl. Springer Spektrum. Springer Berlin, Heidelberg, 2023. Kap. 1.1, S. 13–14. DOI: 10.1007/978-3-662-67464-2 (siehe S. 47, 48).
- [BV09] Stephen Boyd und Lieven Vandenberghe. „Mathematical optimization“. In: *Convex Optimization*. 7. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Cambridge University Press, 2009. Kap. 1.1, S. 1–2. DOI: 10.1017/CBO9780511804441 (siehe S. 32).
- [CF08a] Richard C. Fernow. „Basic concepts“. In: *Principles of Magnetostatics*. 2. Aufl. Cambridge University Press, 2008. Kap. 1, S. 1–15. DOI: 10.1017/9781009291156 (siehe S. 30).
- [CF08b] Richard C. Fernow. „Time-varying fields“. In: *Principles of Magnetostatics*. 2. Aufl. Cambridge University Press, 2008. Kap. 10, S. 229–237. DOI: 10.1017/9781009291156 (siehe S. 32).
- [GH07a] Karl-Heinz Goldhorn und Hans-Peter Heinz. „Norm und Skalarprodukt-Das Vektorprodukt im \mathbb{R}^3 “. In: *Mathematik für Physiker 1*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin, Heidelberg, 2007. Kap. 6.B–6.C, S. 149–157. DOI: 10.1007/978-3-540-48768-5 (siehe S. 19).

- [GH07b] Karl-Heinz Goldhorn und Hans-Peter Heinz. „Vektorfelder und Potenziale“. In: *Mathematik für Physiker 1*. Springer-Lehrbuch. Springer Berlin, Heidelberg, 2007. Kap. 10.B, S. 257–260. DOI: 10.1007/978-3-540-48768-5 (siehe S. 24).
- [Gül10a] Osman Güler. „Differentiation of Functions of Several Variables“. In: *Foundations of Optimization*. 1. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2010. Kap. 1.2, S. 5–7. DOI: 10.1007/978-0-387-68407-9 (siehe S. 21).
- [Gül10b] Osman Güler. „Gradient-Descent Methods“. In: *Foundations of Optimization*. 1. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2010. Kap. 14.1, S. 362–364. DOI: 10.1007/978-0-387-68407-9 (siehe S. 36).
- [Gül10c] Osman Güler. „Newton’s Method“. In: *Foundations of Optimization*. 1. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2010. Kap. 14.5, S. 377–383. DOI: 10.1007/978-0-387-68407-9 (siehe S. 41).
- [Gül10d] Osman Güler. „Nonlinear Programming“. In: *Foundations of Optimization*. 1. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2010. Kap. 9, S. 209–213. DOI: 10.1007/978-0-387-68407-9 (siehe S. 34).
- [Had02] Jacques Hadamard. „Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique“. In: *Princeton University Bulletin* (1902), S. 49–52. URL: <https://babel.hathitrust.org/cgi/pt?id=chi.095582186&view=1up&seq=65> (siehe S. 2).
- [JJ23a] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Cancellations and the Euler Characteristic“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 53–55. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 61).
- [JJ23b] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Category Theory“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 34–35. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 53).
- [JJ23c] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Cohomology“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 3, S. 65–66. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 66).
- [JJ23d] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Eigenvalues of Linear Operators“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 3, S. 69. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 66).
- [JJ23e] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Hypergraphs“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 22. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 50).
- [JJ23f] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Laplace Operators“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 3, S. 77–81. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 79).

- [JJ23g] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Manifolds“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 44–46. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 71).
- [JJ23h] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Relative Homology and the Excision Theorem“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 59–64. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 64).
- [JJ23i] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Simplicial Complexes and Their Homology“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 15–18. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 49).
- [JJ23j] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Singular Homology“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 41–44. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 60).
- [JJ23k] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „The Laplace Operator and the Geometry of Graphs“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 4, S. 84–99. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 90).
- [JJ23l] Parvaneh Joharinad und Jürgen Jost. „Topological Concepts“. In: *Mathematical Principles of Topological and Geometric Data Analysis*. 1. Aufl. Bd. 2. Mathematics of Data. Springer Cham, 2023. Kap. 2, S. 37–38. DOI: 10.1007/978-3-031-33440-5 (siehe S. 55).
- [Lev07] Julie Levandosky. *Classification of Second-Order Equations*. PDF. 2007 (siehe S. 46).
- [Log15] J. David Logan. „PDE Models“. In: *Applied Partial Differential Equations*. 3. Aufl. Undergraduate Texts in Mathematics. Springer International Publishing Switzerland, 2015. Kap. 1.1, S. 1–5. DOI: 10.1007/978-3-319-12493-3 (siehe S. 44).
- [M L11a] John M. Lee. „PDE Models“. In: *Introduction to Topological Manifolds*. 2. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2011. Kap. 1.1, S. 127–128. DOI: 10.1007/978-1-4419-7940-7 (siehe S. 55).
- [M L11b] John M. Lee. „Simplicial Complexes“. In: *Introduction to Topological Manifolds*. 2. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer New York, NY, 2011. Kap. 1.1, S. 147–152. DOI: 10.1007/978-1-4419-7940-7 (siehe S. 57).
- [M L19] John M. Lee. „Differential Forms and Integration“. In: *Introduction to Riemannian Manifolds*. 2. Aufl. Graduate Texts in Mathematics. Springer Cham, 2019. Kap. Appendix B, S. 402–405. DOI: 10.1007/978-3-319-91755-9 (siehe S. 73, 74).
- [Rub17] David Martínez Rubio. „Convergence Analysis of an Adaptive Method of Gradient Descent“. Retrieved 5 January 2024. Magisterarb. University of Oxford, 2017. URL: https://damaru2.github.io/convergence_analysis_hypergradient_descent/dissertation_hypergradients.pdf (siehe S. 43).

- [SB14a] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 1.1–1.3. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 5).
- [SB14b] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 2.1–2.3. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 8).
- [SB14c] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 3.1–3.3. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 10).
- [SB14d] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 4.1–4.2. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 11).
- [SB14e] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 6.2, S. 44–46. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 12).
- [SB14f] Shai Shalev-Shwartz und Shai Ben-David. „Understanding Machine Learning:From Theory to Algorithms“. In: Cambridge University Press, 2014. Kap. 20.1–20.2, S. 228–230. DOI: 10 . 1017/CB09781107298019 (siehe S. 14).
- [THH22] Nathaniel Trask^a, Andy Huang^b und Xiaozhe Hu^c. „Enforcing exact physics in scientific machine learning: A data-driven exterior calculus on graphs“. Paper. ^aCenter for Computing Research, Sandia National Laboratories, United States of America u. a., Jan. 2022. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999122000316> (siehe S. 96, 106).
- [Wan+21] Junyang Wang¹, Jon Cockayne², Oksana Chkrebtii³, T. J. Sullivan⁴ und Chris. J. Oates¹. „Bayesian numerical methods for nonlinear partial differential equations“. In: *Statistics and Computing* 31 (Juli 2021), S. 3. URL: <https://doi.org/10.1007/s11222-021-10030-w> (siehe S. 44).