



Aus dem Institut für Mathematik
der Universität zu Lübeck

Direktor:
Prof. Dr. Jürgen Prestin

Quadraturformeln über sphärische Dreiecke

Inauguraldissertation
zur
Erlangung der Doktorwürde
der Universität zu Lübeck
- Aus der Technisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät -

Vorgelegt von

Dipl.-Inf. Judith Beckmann

aus Hagen, Westfalen

Lübeck, den 06.01.2010

Vorsitzender: Prof. Dr. T. Tantau, Universität zu Lübeck

1. Berichterstatter: Prof. Dr. J. Prestin, Universität zu Lübeck

2. Berichterstatter: Prof. Dr. D. Potts, Technische Universität Chemnitz

Tag der mündlichen Prüfung: 21.04.2010

Zum Druck genehmigt. Lübeck, den 22.04.2010
gez. Prof. Dr. J. Prestin - Dekan der Technisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät -

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	iii
1 Vorbereitendes	1
1.1 Einleitendes zur Kugel und zur sphärischen Geometrie	1
1.2 Gauß-Quadratur	3
1.3 Numerik für Gauß-Quadraturformeln	5
1.3.1 Dreiterm-Rekursion	6
1.3.2 Gautschi-Algorithmus	9
2 Gauß-Quadratur über ein sphärisches Dreieck	17
2.1 Gauß-Quadraturformel über einen Kreisbogen und eine sphärische Kappe	17
2.1.1 Quadraturformel über einen Kreisbogen	17
2.1.2 Quadraturformel über eine sphärische Kappe	19
2.1.3 Kernfunktionen	21
2.2 Integration über ein sphärisches Dreieck	26
2.2.1 Konstruktion einer Gauß-Quadraturformel für gleichschenklige sphärische Dreiecke	29
2.2.2 Quadraturformel über ein beliebiges sphärisches Dreieck	41
2.2.3 Drehung eines sphärischen Dreiecks	46
2.3 Numerische Realisierung der Berechnung der Quadraturformel über ein sphärisches Dreieck	50
2.3.1 Bestimmung der Quadraturformeln über Kreisbögen	51
2.3.2 Auswerten von Polynomen	54
2.3.3 Mathematica und Präzision	56
2.3.4 Vorberechnungen	57
2.3.5 Gesamtdarstellung der Berechnungsschritte	58
2.4 Tests an gleichschenkligen sphärischen Dreiecken	65
2.4.1 Testdaten	65
2.4.2 Berechnungszeiten	66
2.4.3 Präzisionsverluste	69
2.4.4 Vergleich zwischen Lanczos- und Stieltjes-Algorithmus	72
2.4.5 Analyse der Stabilität einzelner Rechenschritte	74
2.4.6 Analyse teurer Rechenschritte	78
2.5 Testrechnungen für beliebige sphärische Dreiecke	81
2.5.1 Testdaten	81

2.5.2	Berechnungszeiten	83
2.5.3	Präzision	83
2.5.4	Bewertung der Quadraturformel	86
2.6	Quadratur über die Sphäre	88
3	Quadraturformeln basierend auf beliebigen Knoten	93
3.1	Konstruktion von Quadraturgewichten zu beliebigen Knoten	93
3.2	Kleinste-Quadrate-Verfahren	99
3.3	Zusammenfassung	101
3.4	Testrechnungen	103
3.4.1	Berechnungszeiten	103
3.4.2	Stabilität, Fehler	104
3.4.3	Bewertung der Quadraturformel	106
3.5	Testrechnung an Beispielen einer Triangulierung der Sphäre	110
3.6	Testrechnungen mit Beispielfunktion	112
	Literaturverzeichnis	115

Einleitung

Die Ursprünge der Integralrechnung liegen in der Bestimmung von Flächen und Flächeninhalten innerhalb einer gegebenen Kurve, eines der ältesten Probleme der Wissenschaft. Angaben zur Geschichte der Integration finden sich z. B. in [7], [4] und [21]. Spezielle Methoden entwickelte bereits Archimedes im dritten Jahrhundert v. Chr. Eine Fläche wird durch reguläre Polygone immer weiter ausgefüllt, und der Flächeninhalt ergibt sich als Limes einer geeignet gewählten Folge von polygonalen Gebieten. Auf diese Weise berechnete Archimedes den Parabelabschnitt und war es ihm möglich, eine untere und obere Grenze für die Kreiszahl π zu finden. Im 17. Jahrhundert gelang es, weitere Fälle zu lösen. Der Lösungsweg, der zum Grenzwert führte, hing dabei von dem zugrundeliegenden Problem ab. Den Zusammenhang zwischen Differentiation und Integration erkannten Newton und Leibniz um 1670. Sie entwickelten die vorhandenen Ansätze zu einer allgemeinen Methode, dies brachte einen großen Fortschritt im Bereich der Integralberechnung mit sich. Im 19. Jahrhundert präziserte Cauchy den Integralbegriff für stetige Funktionen, Riemann für etwas allgemeinere Funktionen.

In der angewandten Mathematik ist die Integralrechnung von fundamentaler Bedeutung. Integrale spielen nicht nur eine Rolle bei der Berechnung von Flächen und Volumina, sondern beispielsweise auch bei Integraltransformationen, wie der Fourier-Transformation oder der sin- und cos-Transformation, bei Anfangswertproblemen gewöhnlicher Differentialgleichungen, bei linearen Randwertproblemen (für eine ausführlichere Darstellung siehe z. B. [7]).

In vielen Fällen, in denen Integrale berechnet werden sollen, ist der Integrand in geschlossener Form gar nicht bekannt, nur einzelne Werte der Funktion liegen z. B. durch Messungen vor. Es gibt auch viele Integrale, die analytisch gar nicht berechnet werden können. Oft ist Integration mit aufwendigen Berechnungen verbunden und kann zu geschlossenen Ausdrücken führen, deren numerischer Wert nur näherungsweise berechnet werden kann. Beispiele hierzu werden z. B. in [6] und [7] erläutert. In der Folge ist eine Theorie von Quadraturformeln zur Approximation eines bestimmten Integrals entwickelt worden. Eine Quadraturformel ist eine endliche Summe aus Funktionswerten des Integranden an einer Menge von diskreten Punkten (die sogenannten Quadraturknoten) aus dem Definitionsbereich des Integranden gewichtet mit sogenannten Quadraturgewichten. Eine Quadraturformel ist also eine „Linearkombination“ ([6]) von Funktionswerten des Integranden. Die Linearität des Integrals bleibt erhalten.

Eine wichtige Strategie, Quadraturformeln zu konstruieren, besteht darin, den Integran-

den durch Funktionen, die analytisch integrierbar sind, zu approximieren und diese Approximation stattdessen zu integrieren. Eine bedeutende Rolle spielen dabei Polynome als Interpolanten des Integranden. Ziel ist es dann, Quadraturformeln zu entwickeln, die exakt für Polynome von gewissem Grad sind. Die Quadraturformel ist konvergent, falls die Gewichte alle nichtnegativ sind.

Integrationsbereiche sind nicht nur aus \mathbb{R} und \mathbb{R}^d , sondern können auch Mannigfaltigkeiten wie z. B. die Sphäre im \mathbb{R}^d sein. Die minimale Anzahl an Punkten, die ein Stück Fläche im Raum festlegen, ist drei. Mit drei Punkten ist ein Dreieck im Raum gegeben. Flächen können aus Dreiecken zusammengesetzt dargestellt werden. Diese Dreiecke sind dann Elemente einer Menge, die als Triangulierung bezeichnet wird. Triangulierungen von Flächen finden wir in vielen Anwendungen, worüber es eine Vielzahl an Literatur (siehe z. B. [17]) gibt. Schon im antiken Griechenland dienten Triangulierungen in der Kartographie der Vermessung der Erdoberfläche. Sie werden in CAD-Systemen (computer-aided design) verwendet. Sie helfen, geologische Strukturen oder die Anatomie des menschlichen Körpers in medizinischen Anwendungen darzustellen. Triangulierungen sind eines der Hauptwerkzeuge im Bereich Visualisierung und Computergraphik. Finite-Elemente-Methoden nutzen Triangulierungen, um partielle Differentialgleichungen numerisch zu lösen. Dreiecke bilden dabei ein Gitternetz, über das die Differentialgleichungen durch stückweise polynomielle Funktionen approximiert und numerisch gelöst werden. So können in Systemen Prozesse simuliert werden.

Unsere besondere Aufmerksamkeit gehört der 2-Sphäre \mathbb{S}^2 im \mathbb{R}^3 . Sie kann Modell der Erdoberfläche in der Meteorologie und Geophysik sein und als Oberfläche des Herzens, der Lunge oder Blase in der medizinischen Modellierung dienen. Triangulierungen der Sphäre, beispielsweise mit dem Algorithmus aus [29], können zu ihrer vollständigen Partitionierung in sphärische Dreiecke führen.

Satelliten, Flugzeuge, GPS u. a. liefern Daten über die Struktur oder physikalische Phänomene wie Temperatur oder Niederschlag an verschiedenen Punkten der Erdoberfläche. In der Medizin erhalten wir Daten durch bildgebende Verfahren wie z. B. Ultraschall oder MRT.

Oft ist es unmöglich, an allen gewünschten Stellen genügend viele Daten zu erhalten, daher geht es in vielen praktischen Anwendungen darum, eine glatte Funktion auf der Sphäre zu finden, die eine gegebene Datenmenge interpoliert oder approximiert (siehe z. B. [28], [8], [20], [19]).

Es gibt viele Arbeiten zu Quadraturformeln auf der Sphäre \mathbb{S}^2 , die exakt für Polynome verschiedenen Grades sind. Einige Arbeiten konstruieren Quadraturgewichte zu Knoten, die an speziellen Stellen der Sphäre liegen (z. B. [32]). Ziel einiger Arbeiten ist es, mit relativ wenigen Knoten eine Quadraturformel mit positiven Gewichten zu entwickeln, die für Polynome mit möglichst hohem Polynomgrad exakt ist (siehe z. B. [30]).

Wir interessieren uns in dieser Arbeit für Anwendungen, bei denen z. B. durch Messungen eine relativ große Menge an Daten auf der Sphäre gegeben ist, deren Lokalisation nicht beeinflusst werden kann.

Für beliebige Knotenmengen C auf der Sphäre sind eine Reihe von Verfahren zur Berechnung von Quadraturformeln entwickelt worden (siehe z. B. [18], [25], [26], [24], [15]).

In dieser Arbeit geht es um Quadraturformeln über sphärische Dreiecke. Mhaskar zeigt in [23], dass über kompakte Untermengen der Sphäre Quadraturformeln mit nichtnegativen Gewichten existieren, die exakt für Polynome vom Höchstgrad n sind. Welche Vorteile könnte es bringen, ein Integrationsgebiet wie die Sphäre zu triangulieren und über die einzelnen Dreiecke zu integrieren?

Mit großen Knotenmengen auf der Sphäre können bei der numerischen Berechnung von Quadraturgewichten Speicherplatzprobleme auftreten. Daher kann es sinnvoll sein, eine Triangulierung T der Sphäre in sphärische Dreiecke vorzunehmen und entsprechend die Knotenmenge C in geeigneter Weise in Untermengen aufzuteilen, so dass für jedes Dreieck Δ , $\Delta \subset T$, die entsprechende Untermenge C_Δ , $C_\Delta \subset C$, Knoten in der Nachbarschaft von Δ enthält. Für jedes einzelne Dreieck Δ der Triangulierung sollen dann Quadraturgewichte zur Knotenmenge C_Δ bestimmt werden.

Soll eine Funktion über die Sphäre integriert werden, die nur in einem kleinen Gebiet auf der Sphäre gut lokalisiert ist, dann ist es für die Approximation des Integrals durch eine Quadraturformel sicherlich von Vorteil, in dem entsprechenden Gebiet möglichst viele Funktionswerte zu kennen, während wir in den Restgebieten weniger Informationen über die Funktion benötigen. Wir erhoffen uns dann ein günstiges Konvergenzverhalten der Quadratur schon bei kleinen Polynomgraden, wenn die Quadraturgewichte speziell für das Gebiet, in dem die Funktion gut lokalisiert ist, berechnet werden.

Wir orientieren uns bei der Konstruktion von Quadraturgewichten über sphärische Dreiecke zu beliebigen Knoten an der Arbeit von Mhaskar und Le Gia in [24]. Da wir bisher über keine zu den Spherical Harmonics auf der \mathbb{S}^2 vergleichbaren orthogonalen Polynome über ein sphärisches Dreieck Δ verfügen, müssen wir in der Lage sein, Integrale $\int_\Delta Y_s(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x})$ mit Spherical Harmonic Y_s zu berechnen. Wir wollen die Integrale möglichst genau bestimmen. Der erste Teil der Arbeit widmet sich der Aufgabe, nach einer Idee von Mhaskar eine Art Gauß-Quadraturformel für die Integration über sphärische Dreiecke zu entwickeln.

Bei der Konstruktion dieser Quadraturformel

- führen wir die Berechnung der Quadraturgewichte und -knoten letztendlich auf die bekannten Gewichte und Knoten der Gauß-Jacobi-Quadratur für algebraische Polynome zurück;
- liegen uns die Integralgrenzen und Integranden in polaren Koordinaten vor; nutzen wir für die Lösung von mehrdimensionalen Integralen bekannte Quadraturformeln für den eindimensionalen Fall;
- gehen wir sozusagen einen Umweg über die Integration über sphärische Kappen, da die Integrationsgrenzen für sphärische Dreiecke nicht leicht zu handhaben sind;

- gehen wir zunächst von speziellen sphärischen Dreiecken aus, und zwar von gleichschenkligen sphärischen Dreiecken, die am Nordpol der Sphäre lokalisiert sind; es ist aber ohne große Probleme möglich, die Quadratur für beliebige sphärische Dreiecke auf diesen Spezialfall zurückzuführen und Dreiecke an beliebigen Positionen der Sphäre an den Nordpol zu verschieben.

Die erste Teil der Arbeit ist in folgende Abschnitte gegliedert:

- Da wir uns bei der Konstruktion der Gauß-artigen Quadraturformel häufig auf die bekannte Gauß-Jacobi-Quadraturformel für algebraische Polynome beziehen, befassen wir uns im ersten Kapitel zunächst mit der numerischen Berechnung dieser Quadraturformeln und nutzen dabei die Resultate von Gautschi in [11]–[14].
- Im zweiten Kapitel entwickeln wir dann Schritt für Schritt die Gauß-Quadraturformel über sphärische Dreiecke. Im Kapitel 2.1.1 beschäftigen wir uns zunächst mit der Integration über Kreisbögen, benutzen die resultierende Quadraturformel im Kapitel 2.1.2 für die Integration über sphärische Kappen und konstruieren schließlich Kerne für spezielle trigonometrische Polynome über sphärische Kappen im Kapitel 2.1.3. Wir beginnen das Kapitel 2.2 damit, sphärische Dreiecke genauer zu betrachten. Für gleichschenklige sphärische Dreiecke, mit einer Ecke am Nordpol der Sphäre lokalisiert, können wir die Integrationsgrenzen bestimmen. Die reproduzierende Eigenschaft der Kerne aus Kapitel 2.1.3 und die Quadratur über Kappen aus Kapitel 2.1.2 führen zum ersten Hauptresultat im Satz 2.15. Zur Bestimmung der Quadraturgewichte bleibt ein Integral zu berechnen, für das wir im Satz 2.19 die Lösung angeben. Kapitel 2.2.2 zeigt, wie wir mit der konstruierten Quadraturformel auch Gewichte und Knoten für beliebige sphärische Dreiecke erhalten. Kapitel 2.2.3 geht darauf ein, wie sphärische Dreiecke an den Nordpol der Sphäre gedreht werden können.
- Im Kapitel 2.3 beschreiben wir, wie wir die Berechnung der Quadraturformel numerisch lösen. Da wir mit Auslöschung zu kämpfen haben, nutzen wir das Computeralgebrasystem Mathematica, das mit Zahlen hoher Präzision rechnen kann, und können so mit diesen Instabilitätsproblemen umgehen. Dies geschieht zwar auf Kosten der Zeit, dafür können die entwickelten Algorithmen Quadraturformeln mit hoher Genauigkeit liefern. Im Kapitel 2.3.5 listen wir die einzelnen Berechnungsschritte zusammenfassend auf.
- Ergebnisse aus Testrechnungen für gleichschenklige sphärische Dreiecke dokumentieren wir im Kapitel 2.4, Testergebnisse für beliebige sphärische Dreiecke im Kapitel 2.5. Das Hauptaugenmerk liegt dabei auf der Darstellung der Berechnungszeiten und der Präzisionsverluste für verschiedene Polynomgrade und Dreiecke unterschiedlicher Größe und geometrischer Eigenschaften. Bei beliebigen Dreiecken interessieren wir uns außerdem für die Anzahl und Größe der negativen Gewichte, die über das Konvergenzverhalten der Quadraturformel entscheiden.
- Einzelne Aspekte im Zusammenhang mit der Quadraturformel haben wir lokal für einzelne sphärische Dreiecke betrachtet. Im Kapitel 2.6 fassen wir die nach Triangulierung der Sphäre für die einzelnen Dreiecke berechneten Gewichte und Knoten

in ihrer Gesamtheit als Quadratur über die gesamte Sphäre für Polynomgrad n auf.

Im Kapitel 3 konstruieren wir zu einer gegebenen beliebigen Knotenmenge C in einem sphärischen Dreieck Δ , deren Knoten ein Fundamentalsystem bilden, Quadraturgewichte, so dass die Quadraturformel exakt für Spherical Harmonics vom Höchstgrad n ist. Wir können davon ausgehen, dass Knoten in Δ ein Fundamentalsystem bilden, falls die Anzahl der Knoten deutlich größer als $(n + 1)^2$ ist.

Im Kapitel 3.1 geht es zunächst um eine Orthonormalbasis bezüglich eines zum $L^2(\mathbb{S}^2)$ -analogen Skalarproduktes für ein sphärisches Dreieck Δ . Wir erhalten in Satz 3.3 eine Orthonormalbasis bezüglich eines diskreten Skalarproduktes zur Knotenmenge C . Mit Hilfe dieser beiden Basen liefert Satz 3.5 Quadraturgewichte zur Knotenmenge C . Diese Quadraturgewichte wiederum sind Lösung eines Kleinste-Quadrate-Problems, wie wir im Kapitel 3.2 zeigen.

Kapitel 3.3 fasst die Schritte zur Berechnung der konstruierten Quadraturgewichte zusammen. Wir beschränken uns dabei auf Verfahren, die auf der Cholesky-Zerlegung beruhen. Es wird deutlich, dass wir, egal auf welche Weise die Gewichte numerisch bestimmt werden, die Gauß-artige Quadratur aus dem ersten Teil der Arbeit benötigen, um die Integrale $\int_{\Delta} Y_s(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x})$ exakt zu berechnen.

Nach Darstellung der Theorie dokumentieren wir im Kapitel 3.4 Ergebnisse, wie Berechnungszeiten, Präzision der Gewichte und Anzahl und Größe der negativen Gewichte, aus Testrechnungen für einzelne sphärische Dreiecke für verschiedene Polynomgrade n und Knotenmengen C . Für kleine Polynomgrade n und Knotenmengen mit hoher Knotenanzahl N , die der Algorithmus aus [1] liefert, erhalten wir Gewichte, die alle nichtnegativ sind.

Im Kapitel 3.5 berechnen wir für die Dreiecke zweier Triangulierungen der Sphäre zu Knotenmengen der Dreiecke die Quadraturgewichte nach dem entwickelten Algorithmus und erhalten so in der Gesamtheit eine Quadraturformel über die gesamte Sphäre. Diese Quadraturformeln über die Sphäre sind exakt für Spherical Harmonics bis zu einem gewissen Grad n .

Mit unseren letzten Testrechnungen im Kapitel 3.6 erfüllt sich eine der Hoffnungen, die wir in die lokale Berechnung von Quadraturgewichten gesetzt haben. Wir wählen eine Sprungfunktion als Testfunktion über die Sphäre und legen in den Bereich der Sphäre, in dem ihre Funktionswerte gleich Eins sind, sonst sind sie gleich Null, relativ viele Knoten, die sich über die Fläche vieler kleiner Dreiecke verteilen. Außerhalb dieses Bereiches sind die Dreiecke teilweise deutlich größer und enthalten weniger Knoten. Globale Verfahren wie die CGNR-Methode, die Gräf, Kunis und Potts in [15] beschreiben, erzielen für gut verteilte Knoten und hohe Polynomgrade sehr gute Ergebnisse. Für den Fall einer Clusterung der Knoten wie hier beschrieben kann es aber von Vorteil sein, die Quadraturgewichte lokal zu bestimmen, was sich an einem kleineren relativen Quadraturfehler

für die Testfunktion zeigt, den wir mit unserer Quadraturformel über sphärische Dreiecke bei kleinem Polynomgrad $n = 3$ im Vergleich erhalten.

An dieser Stelle möchte ich mich bei meinem Doktorvater Prof. J. Prestin ganz herzlich für die ausgezeichnete Betreuung und seine Hilfsbereitschaft bedanken. Mein herzlicher Dank gilt Prof. H. N. Mhaskar für viele Anregungen und Prof. D. Potts und Dipl.-Math. M. Gräf für die Bereitschaft, mit ihrem Algorithmus Quadraturgewichte zu unseren Daten zu berechnen, und für viele wertvolle Hinweise. Dank sagen möchte ich auch den Mitgliedern des Mathematik-Institutes der Universität zu Lübeck, insbesondere der Arbeitsgruppe Analysis. Großer Dank gebührt auch meinen Eltern.

Kapitel 1

Vorbereitendes

In diesem ersten Kapitel befassen wir uns mit einigen Grundlagen und Werkzeugen, die uns bei der Konstruktion und Berechnung von Quadraturformeln über sphärische Dreiecke helfen werden. In einem Abschnitt geht es um einige allgemeine Grundlagen zur Sphäre, zu sphärischen Kappen und sphärischen Dreiecken. In weiteren Abschnitten beschäftigen wir uns mit der Gauß-Jacobi-Quadratur über die reelle Achse und ihrer numerischen Berechnung, da sie Grundlage für die Gauß-artige Quadratur über sphärische Dreiecke, die wir dann im nächsten Kapitel beschreiben, ist.

1.1 Einleitendes zur Sphäre und zur sphärischen Geometrie

Die mathematischen Grundlagen, die wir hier kurz beschreiben, werden beispielsweise in [3] und [10] behandelt.

Es sei \mathbb{S}^2 die Einheitssphäre im \mathbb{R}^3 . Sie wird auch als 2-Sphäre oder einfach als Sphäre bezeichnet. Jeder Punkt $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)^\top$ auf der Sphäre kann auch in Polarkoordinaten (ϑ, ϱ) mit dem longitudinalen Winkel $\vartheta \in [0, \pi]$ und dem äquatorialen Winkel $\varrho \in [0, 2\pi)$ angegeben werden. Dabei beschreibt $\vartheta = 0$ den Nordpol und $\vartheta = \pi$ den Südpol der Sphäre. Es gilt

$$\mathbf{x} = (\sin \vartheta \cos \varrho, \sin \vartheta \sin \varrho, \cos \vartheta)^\top.$$

Mit $L^2(\mathbb{S}^2)$ wird der Hilbertraum mit dem Skalarprodukt

$$\begin{aligned} \langle f, g \rangle_{L^2(\mathbb{S}^2)} &:= \int_{\mathbb{S}^2} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi f(\vartheta, \varrho) \overline{g(\vartheta, \varrho)} \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \end{aligned}$$

für Funktionen $f, g \in L^2(\mathbb{S}^2)$ bezeichnet.

Es sei \mathbb{V}_n der Raum der Spherical Harmonics vom Höchstgrad n . Die Dimension dieses Raumes ist $\dim(\mathbb{V}_n) = (n + 1)^2$.

Für ein beliebiges $n \in \mathbb{N}_0$ bilden die Spherical Harmonics $Y_{q,m}$, $q = 0, 1, \dots, n$, $m = -q, -q + 1, \dots, q - 1, q$, eine Orthonormalbasis des Raumes \mathbb{V}_n bezüglich des $L^2(\mathbb{S}^2)$ -Skalarproduktes. Die Funktionen sind definiert als

$$Y_{q,m}(\vartheta, \varrho) := \sqrt{\frac{2q+1}{4\pi}} P_q^{|m|}(\cos \vartheta) e^{im\varrho} \quad (1.1)$$

mit den assoziierten Legendre-Funktionen $P_q^{|m|}$. Für die assoziierten Legendre-Funktionen $P_q^m : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ mit $m \in \mathbb{N}_0$ und $q = m, m + 1, \dots$ gilt

$$P_q^m(t) = \left(\frac{(q-m)!}{(q+m)!} \right)^{1/2} (1-t^2)^{m/2} \frac{d^m}{dt^m} P_q(t).$$

Die Legendre-Polynome $P_q : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$, $q \in \mathbb{N}_0$, lassen sich u. a. durch die Darstellung

$$P_q(t) = \frac{1}{2^q q!} \frac{d^q}{dt^q} ((t^2 - 1)^q)$$

charakterisieren.

Einer vereinfachten Schreibweise wegen können wir bei der Notation der Spherical Harmonics $Y_{q,m}$, $q = 0, 1, \dots, n$, $m = -q, \dots, q$, mit der Abbildung $l = l(q, m) := q(q+1) + m + 1$ von einer Doppelindizierung auf eine Einfachindizierung übergehen, d. h. $Y_{q,m} = Y_l$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$. In den nächsten Kapiteln sind beide Schreibweisen zu finden.

Interessante Teilbereiche der Sphäre sind sphärische Kappen.

Definition 1.1 *Unter einer sphärischen Kappe mit Zentrum $X_0 \in \mathbb{S}^2$ und Radius μ , $0 < \mu \leq \pi/2$, wollen wir die Menge $\mathbb{S}_\mu^2(X_0) = \{\mathbf{x} \in \mathbb{S}^2 : \langle \mathbf{x}, X_0 \rangle_2 \geq \cos \mu\}$ verstehen, dabei sei $\langle \circ, \circ \rangle_2$ das kanonische Skalarprodukt im \mathbb{R}^3 .*

Eine Hemisphäre sei eine sphärische Kappe mit Radius $\mu = \pi/2$.

Wir beginnen mit einer genaueren Betrachtung eines sphärischen Dreiecks auf der Sphäre \mathbb{S}^2 . Dabei nehmen wir die Darstellungen in [29, S. 418–419] und in [35, S. 769–773] zu Hilfe.

Den Geraden in der Ebene entsprechen die Großkreise auf der Sphäre. Man erhält den Großkreis durch zwei Punkte $P_1 \in \mathbb{S}^2$ und $P_2 \in \mathbb{S}^2$, wenn man die Ebene durch die Punkte P_1, P_2 und den Ursprung mit der Sphäre schneidet. Das kürzeste Verbindungsstück zwischen den Punkten P_1 und P_2 auf dem Großkreis sei $G(P_1, P_2)$. Es hat die Länge $d(P_1, P_2) := \arccos \langle P_1, P_2 \rangle_2 \in [0, \pi]$. Das Großkreisstück $G(P_1, P_2)$ ist eindeutig bestimmt, solange $d(P_1, P_2) \neq \pi$ ist. Sprechen wir von der Distanz zwischen zwei Punkten P_1 und P_2 auf der Sphäre, dann ist diese gleich $d(P_1, P_2)$.

Eine Untermenge $H \in \mathbb{S}^2$ heißt konvex, falls für alle $P_1, P_2 \in H$ die Verbindungsstücke $G(P_1, P_2)$ in H enthalten sind. Die konvexe Hülle H einer endlichen Menge S an Punkten auf der \mathbb{S}^2 ist die kleinste konvexe Menge in \mathbb{S}^2 , die alle Punkte aus S enthält.

Falls es eine Hemisphäre gibt, in der alle Elemente der Menge S liegen, dann kann man

zwischen der kleineren, inneren Region und der größeren, äußeren Region der konvexen Hülle H unterscheiden, die durch Großkreisverbindungen der Elemente von S voneinander abgetrennt sind. Falls es keine Hemisphäre gibt, in der alle Elemente von S lokalisiert sind, dann ist die Sphäre \mathbb{S}^2 die konvexe Hülle der Menge S .

Definition 1.2 Ein sphärisches Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ ist die konvexe Hülle dreier paarweise verschiedener Punkte $P_1, P_2, P_3 \in \mathbb{S}^2$, in einer Hemisphäre gelegen, mit diesen Punkten als Ecken. Die Ecken P_1, P_2, P_3 seien dabei gegen den Uhrzeigersinn angeordnet, d. h. $\langle P_1 \times P_2, P_3 \rangle_2 \geq 0$.

Unter dem Kreuzprodukt zweier Vektoren \mathbf{x} und \mathbf{y} verstehen wir den Vektor $\mathbf{x} \times \mathbf{y} = (x_2y_3 - x_3y_2, x_3y_1 - x_1y_3, x_1y_2 - x_2y_1)^\top$. Die Vektoren \mathbf{x} , \mathbf{y} und $\mathbf{x} \times \mathbf{y}$ bilden ein Rechtssystem, falls $\mathbf{x} \neq 0$ und $\mathbf{y} \neq 0$ gilt. Die Ecken P_1, P_2, P_3 liegen genau dann in einer Ebene, also auf einem gemeinsamen Großkreis, falls $\langle P_1 \times P_2, P_3 \rangle_2 = 0$ ist. Die drei Ecken liegen auf dem Umkreis $U(P_1, P_2, P_3)$ des Dreiecks, dessen Mittelpunkt

$$c(P_1, P_2, P_3) = \frac{(P_2 - P_1) \times (P_3 - P_1)}{\|(P_2 - P_1) \times (P_3 - P_1)\|_2},$$

dabei ist $\|\circ\|_2$ die euklidische Vektornorm, ist (siehe [29, S. 418]), d. h.

$$U(P_1, P_2, P_3) = \{p \in \mathbb{S}^2 : d(c(P_1, P_2, P_3), p) = d(c(P_1, P_2, P_3), P_k)\}, \quad k = 1, 2, 3.$$

Der Radius des Umkreises ist $r(P_1, P_2, P_3) = d(c(P_1, P_2, P_3), P_j)$, $j \in \{1, 2, 3\}$, mit

$$\langle c(P_1, P_2, P_3), P_j \rangle_2 = \frac{\langle P_1 \times P_2, P_3 \rangle_2}{\|(P_2 - P_1) \times (P_3 - P_1)\|_2}.$$

Da die Ecken gegen den Uhrzeigersinn angeordnet sind, also $\langle P_1 \times P_2, P_3 \rangle_2 \geq 0$ ist, gilt $\langle c(P_1, P_2, P_3), P_j \rangle_2 \geq 0$. Außerdem ist $c(P_1, P_2, P_3) \neq P_j$, so dass folglich $0 < r(P_1, P_2, P_3) \leq \pi/2$ (siehe [29, S. 419]). Der Umkreis $U(P_1, P_2, P_3)$ stellt die Grenze einer sphärischen Kappe $\mathbb{S}_{d(c(P_1, P_2, P_3), P_k)}^2(c(P_1, P_2, P_3))$ dar.

Der Winkel zwischen zwei Großkreisen, die sich in einem Punkt schneiden, ist gleich dem Winkel zwischen den Tangenten an die Großkreise in diesem Punkt.

Die Winkel an den Ecken P_1 , P_2 und P_3 des Dreiecks $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ seien α , β und γ . Der Flächeninhalt des sphärischen Dreiecks ist

$$F(\Delta(P_1, P_2, P_3)) = \alpha + \beta + \gamma - \pi.$$

1.2 Gauß-Quadratur

Wir möchten Integrale der Form

$$I(f) = \int_a^b f(x)\omega(x) \, dx,$$

wobei $\omega(x)$ eine nichtnegative Gewichtsfunktion auf dem Intervall $[a, b]$ und f eine reelle, im Intervall $[a, b]$ stetige Funktion sei, näherungsweise mit einer Quadraturformel, die exakt für algebraische Polynome sei, berechnen.

Definition 1.3 (aus [31, S. 396])

Eine Quadraturformel besitzt den Genauigkeitsgrad $m \in \mathbb{N}$, falls sie alle Polynome bis zum Grad m exakt integriert und m die größtmögliche Zahl mit dieser Eigenschaft ist.

Wir definieren die Polynomräume Π_m und \mathbb{H}_m .

Definition 1.4 Für $m \geq 0$ sei \mathbb{H}_m der Raum der univariaten trigonometrischen Polynome vom Höchstgrad m und Π_m der Raum der univariaten algebraischen Polynome vom Höchstgrad m .

Im folgenden Satz geht es um die Existenz von Orthogonalpolynomen (siehe [5, S. 234 u. S. 236], [34, S. 25–26]).

Lemma 1.5 Es sei ω eine nichtnegative und (Riemann-) integrierbare Gewichtsfunktion auf dem Intervall $[a, b]$, $a < b$. Wir nehmen an, dass

$$\int_a^b \omega(x) \, dx > 0$$

ist und die Integrale

$$\int_a^b \omega(x) x^k \, dx, \quad k = 0, 1, \dots,$$

existieren. Dann gibt es ein eindeutiges System reeller Polynome $p_k^{(\omega; a, b)}(x)$ vom Grad k und positiven Leitkoeffizienten mit der Eigenschaft

$$\int_a^b p_k^{(\omega; a, b)}(x) p_l^{(\omega; a, b)}(x) \omega(x) \, dx = \begin{cases} 1, & \text{falls } k = l, \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

für $k, l = 0, 1, \dots$

Die $p_k^{(\omega; a, b)}$ heißen orthonormale Polynome bezüglich der Gewichtsfunktion ω . Ihre Nullstellen sind reell, einfach und liegen im Intervall (a, b) .

Der Genauigkeitsgrad einer Quadraturformel mit n Knoten ist höchstens $(2n - 1)$ ([31, S. 403]). Wir können Gewichte w_k und Knoten x_k , $k = 1, 2, \dots, n$, so wählen, dass die Quadraturformel

$$I(f) = \int_a^b f(x) \omega(x) \, dx \approx \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

exakt für algebraische Polynome $P \in \Pi_{2n-1}$ ist. Diese Quadraturformel ist von Gauß entdeckt und von Jacobi verallgemeinert worden ([5, S. 343]).

Satz 1.6 (Gauß-Jacobi) *Es seien $p_0^{(\omega;a,b)}(x), p_1^{(\omega;a,b)}(x), \dots, p_n^{(\omega;a,b)}(x)$ orthonormale Polynome bezüglich der Gewichtsfunktion ω . Die Nullstellen von $p_n^{(\omega;a,b)}$ seien $x_1 < x_2 < \dots < x_n$, $x_k \in (a, b)$, $k = 1, 2, \dots, n$.*

Dann gibt es positive Gewichte w_1, w_2, \dots, w_n , so dass für alle Polynome $P \in \Pi_{2n-1}$ gilt

$$\int_a^b P(x)\omega(x) \, dx = \sum_{k=1}^n w_k P(x_k).$$

Die Gewichte w_k sind eindeutig durch

$$w_k = \int_a^b \omega(x) \ell_k^2(x) \, dx$$

mit den Lagrange-Polynomen

$$\ell_k(x) = \prod_{j=1, j \neq k}^n \frac{x - x_j}{x_k - x_j}, \quad k = 1, \dots, n,$$

gegeben.

Den Integrationsfehler bei Berechnung des Integrals $I(f)$ mit der Gauß-Quadraturformel geben wir, wie in [5, S. 344] beschrieben, an.

Satz 1.7 (Markoff) *Es seien die Gauß-Gewichte w_k und -Knoten x_k , $k = 1, 2, \dots, n$, und die Gewichtsfunktion ω aus Satz 1.6 gegeben. Ferner sei $f \in C^{2n}[a, b]$. Der Quadraturfehler*

$$E_n(f) := \int_a^b f(x)\omega(x) \, dx - \sum_{k=1}^n w_k f(x_k)$$

beträgt

$$E_n(f) = \frac{f^{(2n)}(\eta)}{(2n)!k_n^2},$$

wobei k_n der Leitkoeffizient des orthonormalen Polynoms $p_n^{(\omega;a,b)}(x)$ ist und $a < \eta < b$ gilt.

1.3 Numerik für Gauß-Quadraturformeln

Allgemein berechnet man Gewichte und Knoten einer Gauß-Jacobi-Quadraturformel bei einer gegebenen, auf einem Intervall $[a, b]$ erklärten, nichtnegativen Gewichtsfunktion ω mit Hilfe der Koeffizienten der Dreiterm-Rekursion, die die orthonormalen Polynome $\{p_k^{(\omega;a,b)}\}$ erfüllen (siehe z. B. [11, S. 290], [12, S. 10], [13]).

Auf die Dreiterm-Rekursion und die Berechnung einer Gauß-Jacobi-Quadraturformel gehen wir im nächsten Abschnitt genauer ein und folgen hierbei der Darstellung in [9, S. 23–31].

1.3.1 Dreiterm-Rekursion

Die Polynome $\{q_k\}$ seien orthogonal bezüglich eines Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle$. Das Polynom q_k habe Polynomgrad k . Daher kann jedes Polynom tq_{j-1} eindeutig als die Summe

$$tq_{j-1} = \sum_{k=0}^j a_k q_k(t), \quad j \geq 1,$$

mit den Koeffizienten

$$a_k = \frac{\langle tq_{j-1}, q_k \rangle}{\langle q_k, q_k \rangle}, \quad k = 0, 1, \dots, j,$$

dargestellt werden. Die Koeffizienten a_k mit $k < j - 2$ sind gleich Null. Dies ergibt sich aus der Orthogonalitätseigenschaft der Polynome, denn

$$a_k = \frac{\langle tq_{j-1}, q_k \rangle}{\langle q_k, q_k \rangle} = \frac{\langle q_{j-1}, tq_k \rangle}{\langle q_k, q_k \rangle} = \frac{\langle q_{j-1}, \sum_{l=0}^{k+1} b_l q_l \rangle}{\langle q_k, q_k \rangle} = \frac{\sum_{l=0}^{k+1} b_l \langle q_{j-1}, q_l \rangle}{\langle q_k, q_k \rangle},$$

und damit ist $a_k = 0$, falls $j - 1 > k + 1$ gilt. Also ergibt sich die Gleichung

$$tq_{j-1}(t) = a_{j-2}q_{j-2}(t) + a_{j-1}q_{j-1}(t) + a_jq_j(t),$$

die zur Dreiterm-Beziehung

$$(t - a_{j-1})q_{j-1}(t) - a_{j-2}q_{j-2}(t) = a_jq_j(t)$$

führt, gewöhnlich dargestellt in der Form

$$\gamma_j q_j(t) = (t - \alpha_j)q_{j-1}(t) - \beta_j q_{j-2}(t) \tag{1.2}$$

mit den Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten

$$\begin{aligned} \gamma_j &:= a_j &= \frac{\langle tq_{j-1}, q_j \rangle}{\langle q_j, q_j \rangle}, \\ \beta_j &:= a_{j-2} &= \frac{\langle tq_{j-1}, q_{j-2} \rangle}{\langle q_{j-2}, q_{j-2} \rangle} = \gamma_{j-1} \frac{\langle q_{j-1}, q_{j-1} \rangle}{\langle q_{j-2}, q_{j-2} \rangle}, \\ \alpha_j &:= a_{j-1} &= \frac{\langle tq_{j-1}, q_{j-1} \rangle}{\langle q_{j-1}, q_{j-1} \rangle}. \end{aligned} \tag{1.3}$$

Die Rekursion startet mit den Polynomen $q_{-1} := 0$ und $q_0(t) := q_0$. Der Wert β_1 kann beliebig gewählt werden.

Auf eine Rekursionsgleichung für normierte orthogonale Polynome führt $\gamma_j = 1$.

Lemma 1.8 *Normierte orthogonale Polynome $\{\hat{q}_k\}$ erfüllen die Dreiterm-Gleichung*

$$\hat{q}_j(t) = (t - \tilde{\alpha}_j)\hat{q}_{j-1}(t) - \tilde{\beta}_j\hat{q}_{j-2}(t), \quad j \geq 1,$$

mit den Startpolynomen $\hat{q}_{-1}(t) := 0$, $\hat{q}_0(t) := 1$ und den Koeffizienten

$$\begin{aligned} \tilde{\beta}_j &:= \frac{\langle \hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle}{\langle \hat{q}_{j-2}, \hat{q}_{j-2} \rangle}, & j > 1, \\ \tilde{\alpha}_j &:= \frac{\langle t\hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle}{\langle \hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle}, & j \geq 1. \end{aligned}$$

Wir wählen für $\tilde{\beta}_1$ hier den Wert $\tilde{\beta}_1 := \langle \hat{q}_0, \hat{q}_0 \rangle$. Für die zugehörigen orthonormalen Polynome $p_j = \hat{q}_j / \langle \hat{q}_j, \hat{q}_j \rangle^{1/2}$ gilt die Rekursionsgleichung

$$\langle \hat{q}_j, \hat{q}_j \rangle^{1/2} p_j(t) = (t - \tilde{\alpha}_j) \langle \hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle^{1/2} p_{j-1}(t) - \tilde{\beta}_j \langle \hat{q}_{j-2}, \hat{q}_{j-2} \rangle^{1/2} p_{j-2}(t), \quad j \geq 1.$$

Diese ist äquivalent zu der Gleichung

$$\frac{\langle \hat{q}_1, \hat{q}_1 \rangle^{1/2}}{\langle \hat{q}_0, \hat{q}_0 \rangle^{1/2}} p_1(t) = (t - \tilde{\alpha}_1) p_0(t)$$

für $j = 1$ und

$$\frac{\langle \hat{q}_j, \hat{q}_j \rangle^{1/2}}{\langle \hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle^{1/2}} p_j(t) = (t - \tilde{\alpha}_j) p_{j-1}(t) - \frac{\langle \hat{q}_{j-1}, \hat{q}_{j-1} \rangle^{1/2}}{\langle \hat{q}_{j-2}, \hat{q}_{j-2} \rangle^{1/2}} p_{j-2}(t)$$

für $j > 1$. Damit kommen wir zum nächsten Resultat.

Lemma 1.9 *Mit der Rekursionsgleichung*

$$\sqrt{\tilde{\beta}_{j+1}} p_j(t) = (t - \tilde{\alpha}_j) p_{j-1}(t) - \sqrt{\tilde{\beta}_j} p_{j-2}(t), \quad j \geq 1,$$

die mit den Polynomen $p_{-1} := 0$, $\hat{q}_0 := 1$ und $p_0 := 1 / \langle \hat{q}_0, \hat{q}_0 \rangle^{1/2} = 1 / \sqrt{\tilde{\beta}_1}$ startet, erhalten wir die orthonormalen Polynome $p_j = \hat{q}_j / \langle \hat{q}_j, \hat{q}_j \rangle^{1/2}$.

Nun wollen wir die orthonormalen Polynome $\{p_k\}$ direkt berechnen. Sie genügen der Dreiterm-Rekursion aus (1.2)

$$\gamma_j p_j(t) = (t - \alpha_j) p_{j-1}(t) - \beta_j p_{j-2}(t)$$

mit den Koeffizienten aus (1.3)

$$\begin{aligned} \gamma_j &= \frac{\langle t p_{j-1}, p_j \rangle}{\langle p_j, p_j \rangle} = \langle t p_{j-1}, p_j \rangle, \\ \beta_j &= \langle t p_{j-1}, p_{j-2} \rangle = \gamma_{j-1} \frac{\langle p_{j-1}, p_{j-1} \rangle}{\langle p_{j-2}, p_{j-2} \rangle} = \gamma_{j-1}, \\ \alpha_j &= \langle t p_{j-1}, p_{j-1} \rangle \end{aligned}$$

und den Startpolynomen $p_{-1}(t) := 0$, $\hat{p}_0(t) := 1$, $p_0(t) := 1 / \langle \hat{p}_0, \hat{p}_0 \rangle^{1/2}$. Also gilt die Gleichung

$$\beta_{j+1} p_j(t) = (t - \alpha_j) p_{j-1}(t) - \beta_j p_{j-2}(t).$$

Mit $\hat{p}_j := \beta_{j+1} p_j$ folgt aus $1 = \langle p_j, p_j \rangle = \frac{1}{\beta_{j+1}^2} \langle \hat{p}_j, \hat{p}_j \rangle$, dass $\beta_{j+1} = \langle \hat{p}_j, \hat{p}_j \rangle^{1/2}$ ist. Der nächste Satz zeigt zusammenfassend, wie mit diesem Stieltjes-Algorithmus orthonormale Polynome berechnet werden können (siehe [9, S. 26]).

Satz 1.10 (Stieltjes-Algorithmus) Die bezüglich des inneren Produktes $\langle \circ, \circ \rangle$ orthonormalen Polynome $\{p_j\}_{j=0}^n$ erfüllen die Dreiterm-Rekursion

$$\begin{aligned}\hat{p}_k(x) &= (x - \alpha_k)p_{k-1}(x) - \beta_k p_{k-2}(x), \\ p_k(x) &= \hat{p}_k(x)/\beta_{k+1}\end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned}p_{-1}(x) &= 0, \\ \hat{p}_0(x) &= 1, \\ \beta_1 &= \langle \hat{p}_0, \hat{p}_0 \rangle^{1/2}, \\ p_0(x) &= 1/\beta_1, \\ \alpha_k &= \langle xp_{k-1}, p_{k-1} \rangle, \\ \beta_k &= \langle \hat{p}_{k-1}, \hat{p}_{k-1} \rangle^{1/2}, \quad k = 1, 2, \dots, n.\end{aligned}$$

Es seien $\{p_j^{(\omega;a,b)}\}_{j=0}^n$ orthonormale Polynome bezüglich einer nichtnegativen Gewichtsfunktion ω , die auf dem Intervall $[a, b]$ definiert sei, d. h.

$$\int_a^b p_k^{(\omega;a,b)}(x)p_j^{(\omega;a,b)}(x)\omega(x) dx = \delta_{k,j}.$$

Diese Polynome genügen der Dreiterm-Rekursion aus Satz 1.10. Die Dreiterm-Koeffizienten seien $\hat{\alpha}_j$ und $\hat{\beta}_j$, $j = 1, \dots, n$. Die Tridiagonal-Matrix

$$\mathbf{J}_n := \begin{pmatrix} \hat{\alpha}_1 & \hat{\beta}_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \hat{\beta}_2 & \hat{\alpha}_2 & \hat{\beta}_3 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \hat{\beta}_{n-1} & \hat{\alpha}_{n-1} & \hat{\beta}_n \\ 0 & \cdots & 0 & \hat{\beta}_n & \hat{\alpha}_n \end{pmatrix} \quad (1.4)$$

heißt Jacobi-Matrix ([9, S. 27]). Mit ihr können die Nullstellen des Polynoms $p_n^{(\omega;a,b)}$ berechnet werden, denn es gilt der folgende Satz ([9, S. 30]).

Satz 1.11 Jede Nullstelle x_j des Polynoms $p_n^{(\omega;a,b)}$ ist ein Eigenwert der Matrix \mathbf{J}_n mit Eigenvektor $\mathbf{q}_{n-1}(x_j) := (p_0^{(\omega;a,b)}(x_j), p_1^{(\omega;a,b)}(x_j), \dots, p_{n-1}^{(\omega;a,b)}(x_j))^T$.

Nun haben wir das Werkzeug zur Hand, um Gauß-Jacobi-Quadraturknoten und -gewichte effizient berechnen zu können. Die Eigenwerte der Jacobi-Matrix sind die Knoten der Quadraturformel. Zur Bestimmung der Gewichte brauchen wir u. a. den jeweils ersten Eintrag der normalisierten Eigenvektoren der Jacobi-Matrix gemäß dem folgenden Satz ([9, S. 30–31]).

Satz 1.12 Für jedes Polynom $P \in \Pi_{2n-1}$ gilt

$$\int_a^b P(t)\omega(t) dt = \sum_{j=1}^n w_j P(x_j)$$

mit den Knoten x_j , $j = 1, \dots, n$, den Nullstellen des Polynoms $p_n^{(\omega;a,b)}$, und den Gewichten $w_j = (\hat{\beta}_1 \mathbf{e}_1^\top \mathbf{s}_j)^2$, wobei die Vektoren \mathbf{s}_j , $j = 1, \dots, n$, die normalisierten Eigenvektoren der Jacobi-Matrix \mathbf{J}_n sind.

Die Berechnung der Quadraturgewichte und -knoten beginnt also mit Bestimmung der Dreiterm-Koeffizienten z. B. mit dem Stieltjes-Algorithmus. Kennt man die Werte der Momente $\mu_r^{(\omega;a,b)} := \int_a^b x^r \omega(x) dx$ und die Koeffizienten der Polynome $p_j^{(\omega;a,b)}$ und $p_{j-1}^{(\omega;a,b)}$, dann kann man daraus leicht die Koeffizienten $\hat{\alpha}_j$ und $\hat{\beta}_j$ und dann die Koeffizienten des Polynoms $p_{j+1}^{(\omega;a,b)}$ berechnen. Leider ist bei dieser Vorgehensweise der Stieltjes-Algorithmus unbrauchbar, da sich Rundungsfehler stark fortpflanzen ([11, S. 293], [12, S. 52]). Möglicherweise sind wir auch gar nicht in der Lage, die Momente $\mu_r^{(\omega;a,b)} = \int_a^b x^r \omega(x) dx$ exakt und effektiv zu berechnen. Wir folgen daher den Überlegungen Gautschis in [11, S. 293–298], [12, S. 90–98], der einen diskretisierten Stieltjes-Algorithmus beschreibt, der im Allgemeinen stabiler ist.

1.3.2 Gautschi-Algorithmus

Es sei ω eine nichtnegative Gewichtsfunktion definiert auf dem Intervall $(-1, 1)$ mit den endlichen Momenten $\mu_r^{(\omega;-1,1)} = \int_{-1}^1 x^r \omega(x) dx$, $r = 0, 1, \dots, 2n - 1$. Das Integral $\int_{-1}^1 P(x) \omega(x) dx$ mit dem Polynom $P \in \Pi_{2n-1}$ soll durch eine geeignete Quadraturformel

$$\int_{-1}^1 P(x) \omega(x) dx = \sum_{m=1}^N w_m P(x_m) \omega(x_m) + R_N(P\omega), \quad N > n,$$

mit den Knoten $x_m = x_m^{(N)} \in (-1, 1)$ und Gewichten $w_m = w_m^{(N)} > 0$ approximiert werden. Die Feinheit der Diskretisierung wird durch den Diskretisierungsparameter N charakterisiert. Diese Quadraturregel soll für $N \rightarrow \infty$ konvergieren. Es seien $p_{k,N}$, $k = 0, 1, \dots, n$, diskrete orthonormale Polynome, d. h. $\sum_{m=1}^N w_m p_{k,N}(x_m) p_{l,N}(x_m) \omega(x_m) = \delta_{k,l}$, und $\alpha_{k,N}$, $\beta_{k,N}$ ihre Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten. Falls

$$\sum_{m=1}^N w_m P(x_m) \omega(x_m) \rightarrow \int_{-1}^1 P(x) \omega(x) dx \quad \text{für } N \rightarrow \infty \quad \text{für alle } P \in \Pi_{2n-1}$$

gilt, dann kann man zeigen (siehe [12, S. 91–92])

$$\alpha_{k,N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \alpha_k, \quad \beta_{k,N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \beta_k$$

und weiter

$$p_{k,N}(x) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} p_k^{(\omega;-1,1)}(x)$$

für jedes feste k , $0 \leq k \leq n$.

Wie wir noch sehen werden, sind für uns Gewichtsfunktionen von der Gestalt $\omega(x) = \omega_1(x)(1-x)^\rho(1+x)^\sigma$, $\rho > -1$, $\sigma > -1$, wobei die Funktion ω_1 glatt im Intervall $[-1, 1]$

sei, von Interesse. Nach Gautschi in [11, S. 294] ist es dann am effektivsten, eine Gauß-Jacobi-Quadraturformel zu wählen. Liegt nicht das Intervall $[-1, 1]$, sondern ein Intervall $[a, 1]$ mit einer reellen Zahl a , $-1 < a < 1$, vor, dann benutzen wir die lineare Funktion

$$\phi_a : [-1, 1] \rightarrow [a, 1], \quad t \mapsto \frac{t+1}{2}(1-a) + a, \quad (1.5)$$

die das Intervall $[-1, 1]$ auf das Intervall $[a, 1]$ abbildet. Wir betrachten die Integrale $\mu_r^{(\omega; a, 1)} = \int_a^1 x^r \omega_1(x)(1-x)^\rho(1+x)^\sigma dx$, $r = 0, 1, \dots, 2n-1$, und substituieren x durch $\phi_a(t)$, dann ist

$$\begin{aligned} & \int_a^1 x^r \omega_1(x)(1-x)^\rho(1+x)^\sigma dx \\ &= \frac{1-a}{2} \int_{-1}^1 \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t)) \left(1 - \frac{1-a}{2}(t+1) - a\right)^\rho \\ & \quad \times \left(1 + \frac{1-a}{2}(t+1) + a\right)^\sigma dt \\ &= \frac{1-a}{2} \int_{-1}^1 \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t)) \left(\frac{1-a}{2}(2-(t+1))\right)^\rho (1+\phi_a(t))^\sigma dt \\ &= \left(\frac{1-a}{2}\right)^{1+\rho} \int_{-1}^1 \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t))(1+\phi_a(t))^\sigma (1-t)^\rho dt. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Für die Approximation des Integrals bestimmen wir zur Gewichtsfunktion $(1-t)^\rho$ die Gauß-Jacobi-Quadraturgewichte und -knoten

$$w_1^{(\rho)}, \dots, w_N^{(\rho)}, \quad x_1^{(\rho)}, \dots, x_N^{(\rho)}, \quad (1.7)$$

die im Inneren des Intervalls $(-1, 1)$ liegen. Die Berechnung kann über die entsprechenden Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten erfolgen, die wir direkt aus dem folgenden Lemma ablesen können.

Lemma 1.13 *Für normierte Jacobi-Polynome, die orthogonal auf dem Intervall $[-1, 1]$ bezüglich der Gewichtsfunktion $(1-x)^\rho(1+x)^\sigma$, $\rho > -1$ und $\sigma > -1$, sind, lassen sich die ersten n Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten $\tilde{\alpha}_j^{(\rho, \sigma)}$ und $\tilde{\beta}_j^{(\rho, \sigma)}$ folgendermaßen generieren:*

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_1^{(\rho, \sigma)} &:= \frac{\sigma - \rho}{\rho + \sigma + 2}, \\ \tilde{\beta}_1^{(\rho, \sigma)} &:= \frac{2^{\rho+\sigma+1} \Gamma(\rho+1) \Gamma(\sigma+1)}{\Gamma(\rho+\sigma+2)}, \\ \tilde{\alpha}_j^{(\rho, \sigma)} &:= \frac{\sigma^2 - \rho^2}{2(j-1)(2(j-1)+2)}, \quad j > 1, \\ \tilde{\beta}_2^{(\rho, \sigma)} &:= \frac{4(\rho+1)(\sigma+1)}{(\rho+\sigma+2)^2(\rho+\sigma+3)}, \\ \tilde{\beta}_j^{(\rho, \sigma)} &:= \frac{4(j-1+\rho)(j-1+\sigma)(j-1+\rho+\sigma)(j-1)}{(2(j-1)+\rho+\sigma)^2(2(j-1)+1+\rho+\sigma)(2(j-1)-1+\rho+\sigma)}, \\ j &> 2. \end{aligned}$$

Dieses Lemma haben wir aus [14] übernommen.

Sind die Koeffizienten $\tilde{\alpha}_j^{(\rho,0)} = \tilde{\alpha}_j^{(\rho)}$ und $\tilde{\beta}_j^{(\rho,0)} = \tilde{\beta}_j^{(\rho)}$, $j = 1, 2, \dots, N$, berechnet, dann können wir die Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J}_N = \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_1^{(\rho)} & \sqrt{\tilde{\beta}_2^{(\rho)}} & 0 & \cdots & 0 \\ \sqrt{\tilde{\beta}_2^{(\rho)}} & \tilde{\alpha}_2^{(\rho)} & \sqrt{\tilde{\beta}_3^{(\rho)}} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sqrt{\tilde{\beta}_{N-1}^{(\rho)}} & \tilde{\alpha}_{N-1}^{(\rho)} & \sqrt{\tilde{\beta}_N^{(\rho)}} \\ 0 & \cdots & 0 & \sqrt{\tilde{\beta}_N^{(\rho)}} & \tilde{\alpha}_N^{(\rho)} \end{pmatrix}$$

aus (1.4) aufstellen. Deren Eigenwerte sind nach Satz 1.11 unsere Gauß-Jacobi-Knoten $x_1^{(\rho)}, \dots, x_N^{(\rho)}$. Als Gauß-Jacobi-Gewichte erhalten wir aus Satz 1.12 die Werte $w_j^{(\rho)} = \tilde{\beta}_1^{(\rho)} (\mathbf{e}_1^\top \mathbf{s}_j^{(\rho)})^2$ mit den normalisierten Eigenvektoren $\mathbf{s}_j^{(\rho)}$, $j = 1, \dots, N$, der Jacobi-Matrix. Die Knoten $x_1^{(\rho)}, \dots, x_N^{(\rho)}$ sind die Nullstellen des orthogonalen Jacobi-Polynoms

$$P_N^{(\rho,0)}(x) = \sum_{j=0}^N \binom{N+\rho}{j} \binom{N}{N-j} \left(\frac{x-1}{2}\right)^{N-j} \left(\frac{x+1}{2}\right)^j \quad (1.8)$$

bzw. des orthonormalen Jacobi-Polynoms

$$p_N^{(\rho,0)}(x) = \left(\frac{2N+\rho+1}{2^{\rho+1}}\right)^{1/2} P_N^{(\rho,0)}(x) \quad (1.9)$$

(siehe z. B. [5, S. 249 u. S. 251]). Es kann sinnvoll sein, die Nullstellen direkt zu ermitteln. Die Gewichte $w_j^{(\rho)}$ können dann mit Hilfe der Darstellung

$$\begin{aligned} (w_j^{(\rho)})^{-1} &= (p_0^{(\rho,0)}(x_j))^2 + (p_1^{(\rho,0)}(x_j))^2 + \dots + (p_{N-1}^{(\rho,0)}(x_j))^2, \\ j &= 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (1.10)$$

aus [34, S. 48] gewonnen werden.

Mit der Funktion ϕ_a bilden wir die $x_k^{(\rho)}$ auf das Intervall $(a, 1)$ ab. Dies führt zu den Knoten

$$s_{1,k} := \phi_a(x_k^{(\rho)}) = \frac{1-a}{2}(x_k^{(\rho)} + 1) + a, \quad k = 1, \dots, N. \quad (1.11)$$

Die zugehörigen Gewichte seien

$$\left(\frac{1-a}{2}\right)^{1+\rho} w_k^{(\rho)}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (1.12)$$

Wir fassen Ausdrücke zusammen und definieren

$$s_{2,k} := \left(\frac{1-a}{2}\right)^{1+\rho} (1+s_{1,k})^\sigma \omega_1(s_{1,k}) w_k^{(\rho)}, \quad k = 1, \dots, N. \quad (1.13)$$

Also können wir die Momente $\mu_r^{(\omega;a,1)}$ durch die Gauß-Quadraturformel

$$\begin{aligned} & \int_a^1 x^r \omega_1(x) (1-x)^\rho (1+x)^\sigma dx \\ &= \left(\frac{1-a}{2} \right)^{1+\rho} \int_{-1}^1 \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t)) (1+\phi_a(t))^\sigma (1-t)^\rho dt \\ &\approx \left(\frac{1-a}{2} \right)^{1+\rho} \sum_{k=1}^N w_k^{(\rho)} s_{1,k}^r \omega_1(s_{1,k}) (1+s_{1,k})^\sigma = \sum_{k=1}^N s_{2,k} s_{1,k}^r \end{aligned}$$

annähern.

Der Quadraturfehler

$$\begin{aligned} & \tilde{E}_{N,\rho}(f_{a,\sigma,r}) \\ &= \int_{-1}^1 \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t)) (1+\phi_a(t))^\sigma (1-t)^\rho dt - \sum_{k=1}^N w_k^{(\rho)} s_{1,k}^r \omega_1(s_{1,k}) (1+s_{1,k})^\sigma \end{aligned}$$

lautet für die Funktionen

$$f_{a,\sigma,r}(t) := \phi_a^r(t) \omega_1(\phi_a(t)) (1+\phi_a(t))^\sigma, \quad r = 0, 1, \dots, 2n-1,$$

nach Satz 1.7

$$\begin{aligned} & \tilde{E}_{N,\rho}(f_{a,\sigma,r}) \\ &= \frac{2^{2N+\rho+1} \Gamma^2(N+\rho+1) (N!)^2}{\Gamma(2N+\rho+1) \Gamma(2N+\rho+2) (2N)!} f_{a,\sigma,r}^{(2N)}(\eta), \end{aligned} \quad (1.14)$$

wobei $-1 < \eta < 1$ und

$$k_N^2 = \frac{\Gamma(2N+\rho+1) \Gamma(2N+\rho+2)}{2^{2N+\rho+1} \Gamma^2(N+\rho+1) (N!)^2}$$

der Leitkoeffizient des Jacobi-Polynoms $p_N^{(\rho,0)}$ zum Quadrat ist (siehe [5, S. 249 u. S. 251]).

Wir definieren nun mit den Knoten und Gewichten ein diskretes Skalarprodukt.

Die normierten Polynome $\hat{q}_{j,N}$, $j = 0, 1, \dots, n$, seien orthogonal in dem Sinne, dass $\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j,N}(s_{1,k}) \hat{q}_{k,N}(s_{1,k}) = 0$ ist, falls $k \neq j$ gilt, und $\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j,N}^2(s_{1,k}) > 0$ ist. Wir wollen nacheinander diese orthogonalen Polynome $\hat{q}_{j,N}$, $j = 0, 1, \dots, n$, an den Stellen $s_{1,k}$, $k = 1, 2, \dots, N$, berechnen. Bezogen auf dieses diskrete Skalarprodukt können wir nach Lemma 1.8 und Lemma 1.9 das folgende Korollar verifizieren.

Korollar 1.14 (Diskretisierter Stieltjes-Algorithmus) *Die normierten Polynome $\hat{q}_{j,N}$, $j = 0, 1, \dots, n$, genügen der Dreiterm-Beziehung*

$$\hat{q}_{j,N}(s_{1,k}) = (s_{1,k} - \tilde{\alpha}_{j,N}) \hat{q}_{j-1,N}(s_{1,k}) - \tilde{\beta}_{j,N} \hat{q}_{j-2,N}(s_{1,k}), \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_{j,N} &:= \frac{\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j-1,N}^2(s_{1,k}) s_{1,k}}{\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j-1,N}^2(s_{1,k})}, \\ \tilde{\beta}_{1,N} &:= \sum_{k=1}^N s_{2,k}, \\ \tilde{\beta}_{j,N} &:= \frac{\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j-1,N}^2(s_{1,k})}{\sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j-2,N}^2(s_{1,k})}, \quad j > 1,\end{aligned}$$

und den Polynomen $\hat{q}_{-1,N} := 0$ und $\hat{q}_{0,N} := 1$. Die Dreiterm-Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j,N}$ und $\hat{\beta}_{j,N}$ der orthonormalen Polynome $p_{j,N} = \hat{q}_{j,N} / \sum_{k=1}^N s_{2,k} \hat{q}_{j,N}^2(s_{1,k})$ sind dann

$$\hat{\alpha}_{j,N} = \tilde{\alpha}_{j,N}$$

und

$$\hat{\beta}_{j,N} = \sqrt{\tilde{\beta}_{j,N}}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Mit diesem diskretisierten Stieltjes-Algorithmus haben wir nun die Möglichkeit, die Dreiterm-Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j,N}$ und $\hat{\beta}_{j,N}$ als Näherungen der Koeffizienten $\hat{\alpha}_j$ und $\hat{\beta}_j$ aus Satz 1.10 zu berechnen. Eine alternative Art der Berechnung stellt der Lanczos-Algorithmus (siehe [12, S. 97–98]) dar. Eine stabile Variante ist von Gragg und Harrod entwickelt worden. Der in [16] aufgeführte RKPW-Algorithmus (Rutishauser-Kahan-Pal-Walker-Algorithmus) wurde von Gautschi in [13] entsprechend angepasst.

Algorithmus 1.15 (Modifizierter Lanczos-Algorithmus aus [13])

Eingabe: Anzahl der zu berechnenden Dreiterm-Koeffizienten n , Gewichte $s_{2,k}$, Knoten $s_{1,k}$, $k = 1, 2, \dots, N$.

Initialisierung: $\tilde{\alpha}_{1,N} = s_{1,1}$, $\tilde{\beta}_{1,N} = s_{2,1}$;

if $n \leq 0$ oder $n > N$
 error('n out of range');

end if

for $j = 1, 2, \dots, N - 1$

$$\gamma_0 = 1, \tilde{\beta}_{j+1,N} = \sigma_0 = \tau_0 = 0, \tilde{\alpha}_{j+1,N} = s_{1,j+1}, p_0 = s_{2,j+1};$$

for $k = 1, 2, \dots, j + 1$

$$\begin{aligned}\rho_k &= \tilde{\beta}_{k,N} + p_{k-1}; \\ \tilde{\beta}_k &= \gamma_{k-1} \rho_k;\end{aligned}$$

```

if  $\rho_k \leq 0$ 
     $\gamma_k = 1;$ 
     $\sigma_k = 0;$ 
else
     $\gamma_k = \tilde{\beta}_{k,N} / \rho_k;$ 
     $\sigma_k = p_{k-1} / \rho_k;$ 
end if

 $\tau_k = \sigma_k (\tilde{\alpha}_{k,N} - s_{1,j+1}) - \gamma_k \tau_{k-1};$ 
 $\tilde{\alpha}_{k,N} \leftarrow \tilde{\alpha}_{k,N} - (\tau_k - \tau_{k-1});$ 

if  $\sigma_k \leq 0$ 
     $p_k = \sigma_{k-1} \tilde{\beta}_{k,N};$ 
else
     $p_k = \tau_k^2 / \sigma_k;$ 
end if

 $\tilde{\beta}_{k,N} = \bar{\beta}_k;$ 

```

end for

end for

return $\tilde{\alpha}_{j,N}, \tilde{\beta}_{j,N}, j = 1, 2, \dots, n.$

Kurz erwahnen wollen wir an dieser Stellen noch eine dritte Methode fur die Berechnung der Dreiterm-Koeffizienten, den modifizierte Chebyshev-Algorithmus, den Gautschi in [11, S. 295–297] und [12, S. 76–78] beschreibt. Wir gehen nicht naher auf ihn ein, da er bei unseren Berechnungen von allen drei Algorithmen der instabilste gewesen ist.

Wir fassen am Ende dieses Abschnitts die einzelnen Schritte zur Berechnung der Koeffizienten zusammen.

Algorithmus 1.16 (Gautschi-Algorithmus)

Eingabe: Anzahl der zu berechnenden Dreiterm-Koeffizienten n , Intervallgrenze a , die Parameter ρ und σ , einen Hochstwert fur N , den wir mit N_{\max} bezeichnen, einen Wert ϵ fur das Abbruchkriterium, Angabe der Abbildungsvorschrift fur die Funktion ω_1 .

Initialisierung: $k = -1, N = 2n - 1, b_j = 1, \hat{\beta}_{j,N} = 0, \hat{\alpha}_{j,N} = 0,$
 $j = 1, 2, \dots, n;$

while $\exists j \in \{1, 2, \dots, n\}: |\hat{\beta}_{j,N} - b_j| > \epsilon |\hat{\beta}_{j,N}|$

```

 $b_j = \hat{\beta}_{j,N}, j = 1, 2, \dots, n;$ 
 $k \leftarrow k + 1;$ 

```

```

if  $k > 1$ 
     $N \leftarrow N + 2^{\lfloor k/5 \rfloor} n;$ 
else
     $N \leftarrow N + 1;$ 
end if

if  $N > N_{\max}$ 
    return  $\hat{\beta}_{j,N}, \hat{\alpha}_{j,N}, j = 1, 2, \dots, n$ , mit einer entsprechenden
    Nachricht;
end if

berechne für die Gewichtsfunktion  $(1-t)^\rho$  im Intervall  $(-1, 1)$  die
    Gewichte  $w_1^{(\rho)}, w_2^{(\rho)}, \dots, w_N^{(\rho)}$  und die Knoten  $x_1^{(\rho)}, x_2^{(\rho)}, \dots, x_N^{(\rho)}$  aus
    (1.7);

berechne die Knoten  $s_{1,r} = \phi_a(x_r^{(\rho)})$  aus (1.11) und die Ausdrücke
 $s_{2,r} = \left(\frac{1-a}{2}\right)^{1+\rho} \omega_1(s_{1,r})(1 + s_{1,r})^\sigma w_r^{(\rho)}$ ,  $r = 1, 2, \dots, N$ , aus (1.13);

berechne die Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten  $\hat{\alpha}_{j,N}$  und  $\hat{\beta}_{j,N}$ ,
 $j = 1, 2, \dots, n$ , mit dem diskretisierten Stieltjes-Algorithmus oder
dem Lanczos-Algorithmus;

end while

return  $\hat{\beta}_{j,N}, \hat{\alpha}_{j,N}, j = 1, 2, \dots, n$ .

```


Kapitel 2

Gauß-Quadratur über ein sphärisches Dreieck

In diesem Kapitel konstruieren wir eine Gauß-artige Quadraturformel über sphärische Dreiecke. Für gleichschenklige sphärische Dreiecke, die am Nordpol lokalisiert sind, liefert Satz 2.15 entsprechende Quadraturgewichte und -knoten. Zur Bestimmung der Quadraturgewichte bleibt ein Integral zu berechnen, die Lösung finden wir im Satz 2.19. Um zu diesen Resultaten zu gelangen, entwickeln wir zunächst eine Quadraturformel über Kreisbögen. Mit dieser Quadratur können wir dann numerisch über sphärische Kappen mit dem Nordpol als Zentrum integrieren. Die Quadratur über sphärische Kappen und die reproduzierende Eigenschaft von Kernen für spezielle trigonometrische Polynome über sphärische Kappen verhelfen uns schließlich zum Resultat aus Satz 2.15.

In weiteren Unterkapiteln zeigen wir, wie wir mit der entwickelten Quadratur über gleichschenklige sphärische Dreiecke am Nordpol auch über allgemeine sphärische Dreiecke, die beliebig auf der Sphäre positioniert sind, numerisch integrieren können.

In den letzten Abschnitten dieses Kapitels gehen wir darauf ein, wie wir die Berechnung der Gewichte und Knoten numerisch realisiert haben, und dokumentieren anschließend einige Resultate aus Testrechnungen. Besonders interessant sind die Ergebnisse im letzten Unterkapitel, die wir aus Testrechnungen an einer triangulierten Sphäre gewonnen haben.

2.1 Gauß-Quadraturformel über einen Kreisbogen und eine sphärische Kappe

2.1.1 Quadraturformel über einen Kreisbogen

Die Gewichtsfunktion

$$g(x) := f(x)(1 - x^2)^{-1/2} > 0 \tag{2.1}$$

sei auf dem Intervall $(\cos(\frac{\zeta - \epsilon}{2}), 1)$, $0 < \zeta - \epsilon \leq 2\pi$, definiert und integrierbar. Die Polynome

$$p_1^{(g; \cos((\zeta - \epsilon)/2), 1)}, \dots, p_{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}^{(g; \cos((\zeta - \epsilon)/2), 1)}$$

seien orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion g . Das Polynom $p_{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}^{(g; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}$ habe die $\lceil \frac{m+1}{2} \rceil$ Nullstellen $x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$,

$$\cos\left(\frac{\zeta - \epsilon}{2}\right) < x_1^{(g; \epsilon, \zeta)} < \dots < x_{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}^{(g; \epsilon, \zeta)} < 1. \quad (2.2)$$

Nach Satz 1.6 ist die Gauß-Jacobi-Quadraturformel mit den Knoten $x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$ und den Gewichten

$$\lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} = \int_{\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2})}^1 \ell_j^2(x) g(x) dx, \quad j = 1, \dots, \lceil \frac{m+1}{2} \rceil, \quad (2.3)$$

exakt für Polynome q vom Höchstgrad m , d. h.

$$\int_{\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2})}^1 q(x) g(x) dx = \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} q(x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}), \quad q \in \Pi_m. \quad (2.4)$$

Satz 2.1 *Es sei die Gewichtsfunktion g aus (2.1) gegeben. Für alle trigonometrischen Polynome $T \in \mathbb{H}_m$ gilt*

$$\int_{\epsilon}^{\zeta} T(t) f\left(\cos\left(t - \frac{\epsilon + \zeta}{2}\right)\right) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} T\left(t_j^{(g; \epsilon, \zeta)} + \frac{\epsilon + \zeta}{2}\right)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} = \lambda_{-j}^{(g; \epsilon, \zeta)}$, $j = 1, 2, \dots, \lceil \frac{m+1}{2} \rceil$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(g; \epsilon, \zeta)} + \frac{\epsilon + \zeta}{2}$, wobei $t_j^{(g; \epsilon, \zeta)} = -t_{-j}^{(g; \epsilon, \zeta)} = \arccos x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$ mit den Nullstellen $x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$ aus (2.2) sei.

Beweis. Ersetzen wir auf der rechten Seite der Gleichung (2.4) x durch $\cos t$, dann können wir wegen des geraden Integranden schreiben

$$\begin{aligned} \int_{\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2})}^1 q(x) f(x) (1-x^2)^{-1/2} dx &= \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} q(\cos t) f(\cos t) dt \\ &= \int_{-\frac{\zeta-\epsilon}{2}}^0 q(\cos t) f(\cos t) dt. \end{aligned}$$

Da $\lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} = \lambda_{-j}^{(g; \epsilon, \zeta)}$, $t_j^{(g; \epsilon, \zeta)} = \arccos x_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$ und $t_{-j}^{(g; \epsilon, \zeta)} = -t_j^{(g; \epsilon, \zeta)}$ ist, erhalten wir für ein gerades trigonometrisches Polynom $q \in \Pi_m$ die Quadraturformel

$$\int_{-\frac{\zeta-\epsilon}{2}}^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} q(\cos t) f(\cos t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} q(\cos t_j^{(g; \epsilon, \zeta)}).$$

Für das ungerade trigonometrische Polynom $\sin t \hat{q}(\cos t)$, $\hat{q} \in \Pi_{m-1}$, gilt

$$0 = \int_{-\frac{\zeta-\epsilon}{2}}^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} \sin t \hat{q}(\cos t) f(\cos t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g; \epsilon, \zeta)} \sin t_j^{(g; \epsilon, \zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g; \epsilon, \zeta)}),$$

wie man durch die folgenden Umformungen

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)}) \\
&= \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)}) + \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}^{-1} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)}) \\
&= \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)}) + \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_{-j}^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_{-j}^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_{-j}^{(g;\epsilon,\zeta)}) \\
&= \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)}) - \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \sin t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} \hat{q}(\cos t_j^{(g;\epsilon,\zeta)})
\end{aligned}$$

erkennen kann.

Für ein beliebiges trigonometrisches Polynom $T(t + \gamma) = q(\cos t) + \sin t \hat{q}(\cos t)$ vom Höchstgrad m mit $\gamma = \frac{\epsilon + \zeta}{2}$ ergibt sich also die Gleichung

$$\int_{-\frac{\zeta-\epsilon}{2}}^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} T(t + \gamma) f(\cos t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(g;\epsilon,\zeta)} T(t_j^{(g;\epsilon,\zeta)} + \gamma).$$

Substitution von $t + \gamma$ in t führt auf das Ergebnis. ■

Liegt die Gewichtsfunktion

$$\omega(\epsilon, \zeta; x) := \begin{cases} (1 - x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2}), 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases} \quad (2.5)$$

vor, dann lässt sich die Quadraturformel aus Satz 2.1 wie folgt darstellen.

Korollar 2.2 Für alle trigonometrischen Polynome $T \in \mathbb{H}_m$ gilt die Quadraturformel

$$\int_{\epsilon}^{\zeta} T(t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{m+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)} T\left(t_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)} + \frac{\epsilon + \zeta}{2}\right) \quad (2.6)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)} = \lambda_{-j}^{(\omega;\epsilon,\zeta)}$, $j = 1, 2, \dots, \lceil \frac{m+1}{2} \rceil$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)} + \frac{\epsilon + \zeta}{2}$. Dabei ist $t_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)} = -t_{-j}^{(\omega;\epsilon,\zeta)} = \arccos x_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)}$ mit den Nullstellen $x_j^{(\omega;\epsilon,\zeta)}$ aus (2.2).

2.1.2 Quadraturformel über eine sphärische Kappe

Im letzten Abschnitt haben wir eine Quadraturformel über einen Kreisbogen kennengelernt. Diese hilft uns nun bei der Integration über eine sphärische Kappe aus Definition

1.1. Ein beliebiges Spherical Harmonic $P \in \mathbb{V}_n$ kann als Linearkombination der Basisfunktionen $Y_{j,k}$ aus (1.1),

$$P(\vartheta, \varrho) = \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} P_j^{|k|}(\cos \vartheta) e^{ik\varrho}$$

mit den Koeffizienten $a_{jk} \in \mathbb{C}$, $j = 0, \dots, n$, $k = -j, \dots, j$, dargestellt werden. Nun betrachten wir das Integral über die sphärische Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ mit Radius μ und Zentrum $X_0 = (0, 0, 1)^\top$ und vertauschen Summation und Integration, so dass

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{S}_\mu^2(X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^\mu P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} e^{ik\varrho} \left(\int_0^\mu P_j^{|k|}(\cos \vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta \right) d\varrho. \end{aligned}$$

Falls k gerade ist, ist die assoziierte Legendre-Funktion $P_j^k(\cos \vartheta)$, $j = 0, \dots, n$, ein gerades trigonometrisches Polynom in ϑ . Falls k ungerade ist, ist sie ein ungerades trigonometrisches Polynom in ϑ . Wenden wir Korollar 2.2 an, so ergeben sich die Quadraturformeln

$$\begin{aligned} &\int_0^\mu P_j^{|k|}(\cos \vartheta) \sin \vartheta \, d\vartheta \\ &= \sum_{r=-\lceil \frac{n+2}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{n+2}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega; 0, \mu)} P_j^{|k|} \left(\cos \left(t_r^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2} \right) \right) \sin \left(t_r^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2} \right) \end{aligned}$$

und

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{ik\varrho} \, d\varrho = \sum_{s=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)} e^{ikt_s^{(\omega; -\pi, \pi)}}.$$

Somit haben wir den folgenden Satz bewiesen.

Satz 2.3 Für alle Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ gilt die Quadraturformel

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{S}_\mu^2(X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^\mu P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \\ &= \sum_{r=-\lceil \frac{n+2}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{n+2}{2} \rceil} \sum_{s=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega; 0, \mu)} \lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)} P \left(t_r^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2}, t_s^{(\omega; -\pi, \pi)} \right) \end{aligned}$$

über die sphärische Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ mit Radius μ und Zentrum $X_0 = (0, 0, 1)^\top$.

2.1.3 Kernfunktionen

In diesem Abschnitt wollen wir uns mit trigonometrischen Polynomen mit bestimmten reproduzierenden Eigenschaften beschäftigen. Wie wir noch sehen werden, werden diese uns bei der Integration über ein sphärisches Dreieck von Nutzen sein. Wir bestimmen als Erstes Kerne für beliebige trigonometrische Polynome über einen Kreisbogen.

Definition 2.4 Die Gewichtsfunktion $\omega(\epsilon, \zeta; \circ)$ aus (2.5) mit $0 < \zeta - \epsilon \leq 2\pi$ sei gegeben. Es seien

$$p_0^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, p_1^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, \dots, p_n^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}$$

die ersten $n + 1$ orthonormalen Polynome bezüglich $\omega(\epsilon, \zeta; \circ)$ und

$$p_0^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, p_1^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, \dots, p_{n-1}^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}$$

die ersten n orthonormalen Polynome bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta; \circ) := (1 - \circ^2)\omega(\epsilon, \zeta; \circ). \quad (2.7)$$

Dann definieren wir die Kerne $K_n(\omega(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ und $K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ als

$$K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) := \sum_{k=0}^n p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u) \quad (2.8)$$

und

$$K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); t, u) := \sum_{k=0}^{n-1} p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u). \quad (2.9)$$

Wir wollen nun zeigen, dass der Kern $K_n(\omega(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ reproduzierende Eigenschaften für gerade trigonometrische Polynome besitzt.

Lemma 2.5 Mit dem Kern $K_n(\omega(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ aus (2.8) gilt für ein beliebiges gerades trigonometrisches Polynom $Q(\cos t)$, $Q \in \Pi_n$, dass

$$Q(\cos t) = \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \, du.$$

Beweis. Die Polynome $p_0^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, p_1^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, \dots, p_n^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}$ bilden ein Orthonormalsystem bezüglich der Gewichtsfunktion $\omega(\epsilon, \zeta; \circ)$ aus (2.5).

Das Polynom $Q(\cos t)$ kann somit als Linearkombination

$$Q(\cos t) = \sum_{j=0}^n a_j p_j^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \quad (2.10)$$

mit gewissen Koeffizienten $a_j \in \mathbb{C}$, $j = 0, \dots, n$, geschrieben werden. Nun betrachten wir das Integral

$$\int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \, du.$$

Da für die Gewichtsfunktion $\omega(\epsilon, \zeta; \circ)$ aus (2.5) die Gleichheit $\omega(\epsilon, \zeta; \cos u) = (\sin u)^{-1}$, $u \in (0, \frac{\zeta-\epsilon}{2})$, gilt, können wir schreiben

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \, du \\ &= \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \omega(\epsilon, \zeta; \cos u) \sin u \, du. \end{aligned}$$

Danach ersetzen wir $K_n(\omega; \circ, \circ)$ durch die Summe aus (2.8) und Q durch die Summe aus (2.10) und vertauschen Integration und Summation, so dass

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \, du \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^n a_j p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \\ & \quad \times \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} p_j^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u) p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u) \omega(\epsilon, \zeta; \cos u) \sin u \, du. \end{aligned}$$

Im nächsten Schritt substituieren wir $\cos u$ durch x , und wegen der Orthonormalitätseigenschaft gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} Q(\cos u) K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t, u) \, du \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^n a_j p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \\ & \quad \times \int_{\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2})}^1 p_j^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(x) p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(x) (1-x^2)^{-1/2} \, dx \\ &= \sum_{j=0}^n \sum_{k=0}^n a_j p_k^{(\omega; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \delta_{jk} \\ &= Q(\cos t). \end{aligned}$$

■

Für ungerade trigonometrische Polynome gilt das folgende Lemma.

Lemma 2.6 *Mit Hilfe der Kernfunktion $K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ aus (2.9) können wir ein beliebiges ungerades trigonometrisches Polynom $\sin t R(\cos t)$, $R \in \Pi_{n-1}$, als*

$$\sin t R(\cos t) = \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} \sin u R(\cos u) \sin t \sin u K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); t, u) \, du$$

darstellen.

Beweis. Die Polynome $p_0^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, p_1^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}, \dots, p_{n-1}^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}$ bilden ein Orthonormalsystem bezüglich der Gewichtsfunktion $\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta; \circ)$ aus (2.7). Daher kann das Polynom $R(\cos t)$ als Linearkombination

$$R(\cos t) = \sum_{j=0}^{n-1} b_j p_j^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \quad (2.11)$$

mit gewissen Koeffizienten $b_j \in \mathbb{C}$, $j = 0, \dots, n-1$, geschrieben werden. Wir ersetzen R durch die Summe aus (2.11) und den Kern $K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ durch die Summe aus (2.9), vertauschen Summation und Integration und erhalten

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} \sin u R(\cos u) \sin t \sin u K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); t, u) \, du \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} b_j p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \sin t \\ & \quad \times \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} p_j^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u) p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos u) \sin^2 u \, du. \end{aligned}$$

Nun substituieren wir $\cos u$ durch x , und wegen der Orthonormalitätseigenschaft gilt

$$\begin{aligned} & \int_0^{\frac{\zeta-\epsilon}{2}} \sin u R(\cos u) \sin t \sin u K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); t, u) \, du \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} b_j p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \sin t \\ & \quad \times \int_{\cos(\frac{\zeta-\epsilon}{2})}^1 p_j^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(x) p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(x) (1-x^2)(1-x^2)^{-1/2} \, dx \\ &= \sum_{j=0}^{n-1} \sum_{k=0}^{n-1} b_j p_k^{(\tilde{\omega}; \cos((\zeta-\epsilon)/2), 1)}(\cos t) \sin t \delta_{jk} \\ &= \sin t R(\cos t). \end{aligned}$$

■

Wir definieren ein aus den Kernen $K_n(\omega(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ und $K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ zusammengesetztes trigonometrisches Polynom.

Definition 2.7 *Es seien die Winkel ϵ und ζ , $0 < \zeta - \epsilon \leq 2\pi$, gegeben. Unter dem Kern $K_n^*(\epsilon, \zeta; \circ, \circ)$ verstehe man das aus den Kernen $K_n(\omega(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ aus (2.8) und $K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); \circ, \circ)$ aus (2.9) zusammengesetzte Polynom*

$$\begin{aligned} K_n^*(\epsilon, \zeta; t, u) &:= \frac{1}{2} \left(K_n(\omega(\epsilon, \zeta); t - \gamma, u - \gamma) + \sin(t - \gamma) \sin(u - \gamma) \right. \\ & \quad \left. \times K_{n-1}(\tilde{\omega}(\epsilon, \zeta); t - \gamma, u - \gamma) \right), \quad \gamma = \frac{\epsilon + \zeta}{2}. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Seine reproduzierende Eigenschaft überprüfen wir in dem sich anschließenden Lemma.

Lemma 2.8 *Jedes trigonometrische Polynom $T \in \mathbb{H}_n$ lässt sich mit dem Kern aus (2.12) als*

$$T(t) = \int_{\epsilon}^{\zeta} T(u) K_n^*(\epsilon, \zeta; t, u) \, du$$

darstellen.

Beweis. Nach der Substitution $u = v + \gamma$, wobei $\gamma = \frac{\epsilon + \zeta}{2}$ ist, gilt

$$\int_{\epsilon}^{\zeta} T(u) K_n^*(\epsilon, \zeta; t, u) \, du = \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} T(v + \gamma) K_n^*(\epsilon, \zeta; t, v + \gamma) \, dv.$$

Für ein beliebiges trigonometrisches Polynom $T \in \mathbb{H}_n$ existieren Polynome $Q \in \Pi_n$ und $R \in \Pi_{n-1}$, so dass

$$T(t + \gamma) = Q(\cos t) + \sin t R(\cos t).$$

Also ist

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} T(v + \gamma) K_n^*(\epsilon, \zeta; t, v + \gamma) \, dv \\ &= \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} (Q(\cos v) + \sin v R(\cos v)) \\ & \quad \times \frac{1}{2} \left(K_n(\omega; t - \gamma, v) + \sin(t - \gamma) \sin v K_{n-1}(\tilde{\omega}; t - \gamma, v) \right) \, dv. \end{aligned}$$

Der Kern $K_n(\omega; t - \gamma, v)$ ist gerade in v , während $\sin(t - \gamma) \sin v K_{n-1}(\tilde{\omega}; t - \gamma, v)$ ungerade in v ist. Ausmultiplizieren ergibt also

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} (Q(\cos v) + \sin v R(\cos v)) \\ & \quad \times \frac{1}{2} \left(K_n(\omega; t - \gamma, v) + \sin(t - \gamma) \sin v K_{n-1}(\tilde{\omega}; t - \gamma, v) \right) \, dv \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} Q(\cos v) K_n(\omega; t - \gamma, v) \, dv \\ & \quad + \frac{1}{2} \int_{-\frac{\zeta - \epsilon}{2}}^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} \sin v R(\cos v) \sin(t - \gamma) \sin v K_{n-1}(\tilde{\omega}; t - \gamma, v) \, dv \\ &= \int_0^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} Q(\cos v) K_n(\omega; t - \gamma, v) \, dv \\ & \quad + \int_0^{\frac{\zeta - \epsilon}{2}} \sin v R(\cos v) \sin(t - \gamma) \sin v K_{n-1}(\tilde{\omega}; t - \gamma, v) \, dv. \end{aligned}$$

Nach Lemma 2.5 und Lemma 2.6 ist diese Integral gleich

$$Q(\cos(t - \gamma)) + \sin(t - \gamma)R(\cos(t - \gamma)) = T(t).$$

■

Wir konstruieren ein weiteres trigonometrisches Polynom.

Definition 2.9 *Es sei eine sphärische Kappe $\mathbb{S}_\mu(X_0)$ mit Radius μ und Zentrum $X_0 = (0, 0, 1)^\top$ gegeben. Das trigonometrische Polynom $K_n^*(\mu; (\circ, \circ), (\circ, \circ))$ sei definiert als das Produkt aus den Polynomen*

$$K_{n+1}^*(0, \mu; \circ, \circ) \quad \text{und} \quad K_n^*(-\pi, \pi; \circ, \circ)$$

aus (2.12), d. h.

$$K_n^*(\mu; (\vartheta, \varrho), (\phi, \psi)) := K_{n+1}^*(0, \mu; \vartheta, \phi)K_n^*(-\pi, \pi; \varrho, \psi). \quad (2.13)$$

Wir definieren den Raum spezieller trigonometrischer Polynome über eine Kappe $\mathbb{S}_\mu(X_0)$.

Definition 2.10 *Es sei \mathbb{W}_{n+1} der Raum der trigonometrischen Polynome $P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta$, wobei $P \in \mathbb{V}_n$ ist.*

Das trigonometrische Polynom $K_n^*(\mu; (\circ, \circ), (\circ, \circ))$ zeigt eine reproduzierende Eigenschaft für diese trigonometrischen Polynome über die Kappe $\mathbb{S}_\mu(X_0)$.

Lemma 2.11 *Für alle $P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \in \mathbb{W}_{n+1}$ ist*

$$P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta = \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^\mu P(\phi, \psi) K_n^*(\mu; (\vartheta, \varrho), (\phi, \psi)) \sin \phi \, d\phi \, d\psi.$$

Beweis. Ein Spherical Harmonic $P \in \mathbb{V}_n$ kann in der Form

$$P(\vartheta, \varrho) = \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} P_j^{|k|}(\cos \vartheta) e^{ik\varrho}$$

mit Koeffizienten $a_{jk} \in \mathbb{C}$, $j = 0, \dots, n$, $k = -j, \dots, j$, dargestellt werden.

Die assoziierten Legendre-Funktionen $P_j^{|k|}(\cos \vartheta)$ multipliziert mit $\sin \vartheta$ sind trigonometrische Polynome vom Höchstgrad $n+1$ in ϑ und die Monome $e^{ik\varrho}$ sind trigonometrische Polynome vom Höchstgrad n in ϱ . Nach Lemma 2.8 ist demnach

$$\int_0^\mu P_j^{|k|}(\cos \phi) \sin \phi K_{n+1}^*(0, \mu; \vartheta, \phi) \, d\phi = P_j^{|k|}(\cos \vartheta) \sin \vartheta$$

und

$$\int_{-\pi}^{\pi} e^{ik\psi} K_n^*(-\pi, \pi; \varrho, \psi) \, d\psi = e^{ik\varrho}.$$

Also ergibt sich die Behauptung mit

$$\begin{aligned}
& P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \\
&= \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} P_j^{|k|}(\cos \vartheta) \sin \vartheta e^{ik\varrho} \\
&= \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \\
&\quad \times \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\mu} P_j^{|k|}(\cos \phi) \sin \phi e^{ik\psi} K_{n+1}^*(0, \mu; \vartheta, \phi) K_n^*(-\pi, \pi; \varrho, \psi) \, d\phi \, d\psi \\
&= \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\mu} P(\phi, \psi) K_n^*(\mu; (\vartheta, \varrho), (\phi, \psi)) \sin \phi \, d\phi \, d\psi.
\end{aligned}$$

■

2.2 Integration über ein sphärisches Dreieck

In diesem Kapitel wollen wir eine Gauß-artige Quadraturformel über ein sphärisches Dreieck herleiten. Einige allgemeine Aspekte zu sphärischen Dreiecken haben wir im Kapitel 1.1 vermerkt. Wir wollen im Folgenden zunächst ganz spezielle Dreiecke betrachten und für diese Quadraturgewichte und -knoten bestimmen. Später werden wir sehen, dass sich Quadraturformeln über allgemeinere Dreiecke mit Hilfe dieser Spezialfälle entwickeln lassen. Diese speziellen Dreiecke sollen in einer sphärischen Kappe $\mathbb{S}_{\mu}^2(X_0)$ mit Radius μ am Nordpol der \mathbb{S}^2 liegen, und eine der Ecken soll der Nordpol X_0 selber sein. Die beiden übrigen Ecken P'_1 und P'_2 seien so gewählt, dass sie auf der Grenze der Kappe lokalisiert sind. Es sind also gleichschenklige Dreiecke, und die gleich langen Seiten $G(X_0, P'_1)$ und $G(X_0, P'_2)$ sind von der Länge $\mu = d(X_0, P'_1) = d(X_0, P'_2)$.

Die zu den Ecken P'_1 und P'_2 gehörenden äquatorialen Winkel wollen wir mit α und β bezeichnen. In kartesischen Koordinaten ist dann

$$\begin{aligned}
X_0 &= (0, 0, 1)^{\top}, \\
P'_1 &= (\sin \mu \cos \alpha, \sin \mu \sin \alpha, \cos \mu)^{\top}, \\
P'_2 &= (\sin \mu \cos \beta, \sin \mu \sin \beta, \cos \mu)^{\top}.
\end{aligned}$$

Es sei $\beta - \alpha < 2\pi$ und $\alpha < \beta$. Diese Annahme ist sinnvoll, da die Ecken entgegen dem Uhrzeigersinn angeordnet sind und im Rechtssystem Drehungen mit positivem Drehwinkel Drehungen entgegen dem Uhrzeigersinn darstellen. D. h. durch eine Drehung entgegen dem Uhrzeigersinn um die z -Achse um den Winkel $\iota = \beta - \alpha > 0$, beschrieben durch die Matrix

$$\begin{pmatrix} \cos \iota & -\sin \iota & 0 \\ \sin \iota & \cos \iota & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

wird der Punkt P'_1 auf Punkt P'_2 abbildet, da

$$\begin{pmatrix} \cos \iota & -\sin \iota & 0 \\ \sin \iota & \cos \iota & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \alpha \\ \sin \mu \sin \alpha \\ \cos \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \mu \cos(\alpha + \iota) \\ \sin \mu \sin(\alpha + \iota) \\ \cos \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \beta \\ \sin \mu \sin \beta \\ \cos \mu \end{pmatrix}.$$

Weil es sich um äquatoriale Winkel von Dreiecksecken handelt, gilt die weitere Einschränkung $\beta - \alpha \leq \pi$.

Ist $\mu = \pi/2$, also

$$\begin{aligned} X_0 &:= (0, 0, 1)^\top, \\ P'_1 &:= (\cos \alpha, \sin \alpha, 0)^\top, \\ P'_2 &:= (\cos \beta, \sin \beta, 0)^\top, \end{aligned} \tag{2.14}$$

dann ist die Grenze der sphärischen Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ der Großkreis in der x - y -Ebene und die Dreiecksseite zwischen P'_1 und P'_2 ein Teilstück $G(P'_1, P'_2)$ dieses Großkreises. In Analogie zu der Quadraturformel aus Satz 2.3 können wir das folgende Lemma formulieren.

Lemma 2.12 *Für alle Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ gilt die Quadraturformel*

$$\begin{aligned} \int_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) &= \int_\alpha^\beta \int_0^{\pi/2} P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \\ &= \sum_{r=-\lceil \frac{n+2}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{n+2}{2} \rceil} \sum_{s=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega; 0, \pi/2)} \lambda_s^{(\omega; \alpha, \beta)} P \left(t_r^{(\omega; 0, \pi/2)} + \frac{\pi}{4}, t_s^{(\omega; \alpha, \beta)} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \end{aligned}$$

über das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken aus (2.14).

Schwieriger wird es, wenn $0 < \mu < \pi/2$ oder $\pi/2 < \mu < \pi$ ist. Für $\beta - \alpha = \pi$ liegen die Punkte X_0 , P'_1 und P'_2 auf ein und demselben Großkreis. Das Problem lässt sich dann auf die Integration über einen Kreisbogen zurückführen. Es sei im weiteren Verlauf $0 < \beta - \alpha < \pi$. Für die Dreiecke stimmen in diesem Fall das Stück auf der Grenze der Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ zwischen P'_1 und P'_2 und das Großkreisstück $G(P'_1, P'_2)$, das eine der Kanten des sphärischen Dreiecks bildet, nicht überein, wenn $\mu \neq \pi/2$ ist. Wir wollen die Punkte auf der Dreiecksseite $G(P'_1, P'_2)$ beschreiben. Die polaren Winkel der Punkte auf dem Großkreisstück $G(P'_1, P'_2)$ lassen sich in Abhängigkeit von den zugehörigen äquatorialen Winkeln darstellen.

Lemma 2.13 *Es sei das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken*

$$\begin{aligned} X_0 &= (0, 0, 1)^\top, \\ P'_1 &= (\sin \mu \cos \alpha, \sin \mu \sin \alpha, \cos \mu)^\top, \\ P'_2 &= (\sin \mu \cos \beta, \sin \mu \sin \beta, \cos \mu)^\top \end{aligned}$$

mit Radius μ , $\mu \neq \pi/2$, und den Winkeln α und β , $0 < \beta - \alpha < \pi$, gegeben. Der Anteil des Großkreises $G(P'_1, P'_2)$, der P'_1 mit P'_2 verbindet, besteht aus allen Punkten $(\tilde{\theta}(\tilde{\phi}), \tilde{\phi})$, für die

$$\alpha \leq \tilde{\phi} \leq \beta$$

und

$$\tilde{\theta}(\tilde{\phi}) = \begin{cases} \arctan \left(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right), & \text{falls } 0 < \mu < \pi/2, \\ \arctan \left(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right) + \pi, & \text{falls } \pi/2 < \mu < \pi, \end{cases}$$

mit

$$T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} := \tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right) \quad (2.15)$$

ist.

Beweis. Die Vektoren P'_1 und P'_2 spannen eine Ebene mit der Koordinatendarstellung

$$E : \langle \mathbf{n}, \mathbf{x} \rangle_2 = 0$$

auf, dabei ist

$$\mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \alpha \\ \sin \mu \sin \alpha \\ \cos \mu \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \beta \\ \sin \mu \sin \beta \\ \cos \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 \sin \mu \cos \mu \cos \left(\frac{\alpha + \beta}{2} \right) \sin \left(\frac{\alpha + \beta}{2} \right) \\ -2 \sin \mu \cos \mu \sin \left(\frac{\alpha + \beta}{2} \right) \sin \left(\frac{\alpha + \beta}{2} \right) \\ \sin^2 \mu \sin(\beta - \alpha) \end{pmatrix}$$

der Normalenvektor der Ebene. Die Punkte P , die auf dem Großkreis in der Ebene E liegen, haben die Vektorlänge Eins und erfüllen diese Koordinatengleichung. Die polaren Winkel $\tilde{\theta}$ und die äquatorialen Winkel $\tilde{\phi}$ der Punkte P genügen also der Gleichung

$$\left\langle \mathbf{n}, \begin{pmatrix} \sin \tilde{\theta} \cos \tilde{\phi} \\ \sin \tilde{\theta} \sin \tilde{\phi} \\ \cos \tilde{\theta} \end{pmatrix} \right\rangle_2 = 0.$$

Weitere Umformungen führen auf die Gleichung

$$\sin^2 \mu \sin(\beta - \alpha) \cos \tilde{\theta} = 2 \sin \mu \cos \mu \sin \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right) \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \sin \tilde{\theta}.$$

Uns interessiert das kürzeste Verbindungsstück zwischen den Punkten P'_1 und P'_2 auf dem Großkreis. Mit $\alpha \leq \tilde{\phi} \leq \beta$ und $0 < \beta - \alpha < \pi$ ist $-\frac{\pi}{2} < \tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} < \frac{\pi}{2}$, und da $\mu \neq \pi/2$, gilt

$$\tan \tilde{\theta} = \frac{\sin^2 \mu \sin(\beta - \alpha)}{2 \sin \mu \cos \mu \sin \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right) \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right)} = \frac{\tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right)}{\cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right)}.$$

Ist $0 < \mu < \pi/2$, dann ist

$$\frac{\tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right)}{\cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right)} > 0$$

und

$$\tilde{\theta} = \arctan \left(\tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right) / \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right) > 0.$$

Ist $\pi/2 < \mu < \pi$, dann ist

$$\tilde{\theta} = \arctan \left(\tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right) / \cos \left(\tilde{\phi} - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right) + \pi > 0.$$

■

Bemerkung 2.14 Ein sphärisches Dreieck $\Delta(P_1, P_2, X_0)$ mit den Ecken

$$\begin{aligned} X_0 &:= (0, 0, 1)^\top, \\ P_1 &:= (\sin \mu_1 \cos \alpha, \sin \mu_1 \sin \alpha, \cos \mu_1)^\top, \\ P_2 &:= (\sin \mu_2 \cos \beta, \sin \mu_2 \sin \beta, \cos \mu_2)^\top, \end{aligned}$$

wobei $0 < \mu_1 < \pi/2$, $0 < \mu_2 < \pi/2$ und $0 < \beta - \alpha < \pi$ gilt, das also nicht unbedingt gleichschenkelig ist, stellt die Menge aller Punkte

$$\Gamma : \alpha \leq \phi \leq \beta, \\ 0 \leq \theta \leq \arctan \left(\frac{\sin \mu_1 \sin \mu_2 \sin(\beta - \alpha)}{\cos \mu_1 \sin \mu_2 \sin(\beta - \varrho) + \cos \mu_2 \sin \mu_1 \sin(\varrho - \alpha)} \right)$$

dar.

2.2.1 Konstruktion einer Gauß-Quadraturformel für gleichschenkelige sphärische Dreiecke

Das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken

$$\begin{aligned} X_0 &= (0, 0, 1)^\top, \\ P'_1 &= (\sin \mu \cos \alpha, \sin \mu \sin \alpha, \cos \mu)^\top, \\ P'_2 &= (\sin \mu \cos \beta, \sin \mu \sin \beta, \cos \mu)^\top, \end{aligned} \tag{2.16}$$

mit dem Radius μ , $0 < \mu < \pi/2$, und den Winkeln α und β , $0 < \beta - \alpha < \pi$, ist also nach Lemma 2.13 die Menge aller Punkte, deren Polarkoordinaten (θ, ϕ) zu der Menge

$$\Gamma : \alpha \leq \phi \leq \beta \quad \text{und} \quad 0 \leq \theta \leq \arctan \left(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos \left(\phi - \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right)$$

gehören, und damit ist

$$\begin{aligned} &\int_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos(\phi - \frac{\alpha + \beta}{2}))} P(\theta, \phi) \sin \theta \, d\theta \, d\phi. \end{aligned} \tag{2.17}$$

Dreiecke mit Winkel μ , $\pi/2 < \mu < \pi$, wollen wir nicht weiter betrachten. Durch Aufteilung in Unterdreiecke könnten wir sie auf bekannte Fälle zurückführen.

Im weiteren Verlauf konstruieren wir eine Quadraturformel für das Integral aus (2.17), die exakt für alle Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ ist. Dabei kommen das trigonometrische Polynom aus (2.13) wie auch die folgenden Quadraturformeln ins Spiel.

Es sei die Gewichtsfunktion ω aus (2.5) gegeben, und zwar zum einen als

$$\omega(0, \mu; x) := \begin{cases} (1 - x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos(\frac{\mu}{2}), 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

zum anderen als

$$\omega(-\pi, \pi; x) := \begin{cases} (1 - x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (-1, 1), \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Nach Korollar 2.2 gilt für alle trigonometrischen Polynome $T \in \mathbb{H}_{2n+2}$ die Quadraturformel

$$\int_0^\mu T(t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil} \lambda_j^{(\omega; 0, \mu)} T\left(t_j^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2}\right) \quad (2.18)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(\omega; 0, \mu)} = \lambda_{-j}^{(\omega; 0, \mu)} = \int_{\cos(\mu/2)}^1 \ell_j^2(x) \omega(0, \mu; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, \lceil \frac{2n+3}{2} \rceil$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2}$, $t_j^{(\omega; 0, \mu)} = -t_{-j}^{(\omega; 0, \mu)} = \arccos x_j^{(\omega; 0, \mu)}$ mit den Nullstellen $x_j^{(\omega; 0, \mu)}$ des Polynoms $p_{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)}$ aus (2.2). Analog dazu erhalten wir für alle trigonometrischen Polynome $T \in \mathbb{H}_{2n}$ die Quadraturformel

$$\int_{-\pi}^\pi T(t) dt = \sum_{j=-\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(\omega; -\pi, \pi)} T(t_j^{(\omega; -\pi, \pi)}) \quad (2.19)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(\omega; -\pi, \pi)} = \lambda_{-j}^{(\omega; -\pi, \pi)} = \int_{-1}^1 \ell_j^2(x) \omega(-\pi, \pi; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, \lceil \frac{2n+1}{2} \rceil$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(\omega; -\pi, \pi)} = -t_{-j}^{(\omega; -\pi, \pi)} = \arccos x_j^{(\omega; -\pi, \pi)}$ mit den Nullstellen $x_j^{(\omega; -\pi, \pi)}$ des Polynoms $p_{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil}^{(\omega; -1, 1)}$ aus (2.2).

Im nächsten Satz findet sich unser erstes Hauptresultat für Gewichte und Knoten einer Quadratur über ein sphärisches Dreieck.

Satz 2.15 *Es sei das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken aus (2.16) gegeben, sowie die Knoten und Gewichte der Quadraturformeln aus (2.18) und (2.19) und der Kern $K_n^*(\mu; (\circ, \circ), (\circ, \circ))$ aus (2.13). Für alle Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ kann das Integral aus (2.17) exakt mit der Quadraturformel*

$$\int_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta d\vartheta d\varrho$$

$$\begin{aligned}
&= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \\
&= \sum_{r=-\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil} \sum_{s=-\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} w_{r,s}^{(n,\mu,\alpha,\beta)} P(\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)})
\end{aligned}$$

mit den Knoten

$$\begin{aligned}
(\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)}) &:= \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}, t_s^{(\omega;-\pi,\pi)} \right), \\
r &= -\left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil, \\
s &= -\left\lceil \frac{2n+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{2n+1}{2} \right\rceil,
\end{aligned} \tag{2.20}$$

und den Gewichten

$$\begin{aligned}
w_{r,s}^{(n,\mu,\alpha,\beta)} &:= \\
&\lambda_r^{(\omega;0,\mu)} \lambda_s^{(\omega;-\pi,\pi)} \sin(\chi_r^{(n,\mu)}) \\
&\times \left(\int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} K_n^*(\mu; (\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)}), (\vartheta, \varrho)) \, d\vartheta \, d\varrho \right)
\end{aligned} \tag{2.21}$$

bestimmt werden.

Beweis. Mit Hilfe des Kerns $K_n^*(\mu; (\circ, \circ), (\circ, \circ))$ aus (2.13) erhalten wir nach Lemma 2.11 die Darstellung

$$\begin{aligned}
&\int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} P(\vartheta, \varrho) \sin \vartheta \, d\vartheta \, d\varrho \\
&= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} \\
&\quad \left(\int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\mu} P(\phi, \psi) K_n^*(\mu; (\phi, \psi), (\vartheta, \varrho)) \sin \phi \, d\phi \, d\psi \right) d\vartheta \, d\varrho.
\end{aligned}$$

Wir stellen das Spherical Harmonic $P \in \mathbb{V}_n$ als Linearkombination

$$P(\phi, \psi) = \sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} P_j^{|k|}(\cos \phi) e^{ik\psi}$$

der Basisfunktionen $Y_{j,k}$ dar.

Leicht können wir verifizieren, dass $P_j^{|k|}(\cos \phi) \sin \phi K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta)$ ein trigonometrisches Polynom in ϕ vom Grad höchstens $2n+2$ und $e^{ik\psi} K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho)$ ein trigonometrisches Polynom in ψ vom Höchstgrad $2n$ ist. Daraus folgt, dass mit den Gewichten und Knoten der Quadraturformeln aus (2.18) und (2.19) die Gleichungen

$$\int_0^{\mu} P_j^{|k|}(\cos \phi) \sin \phi K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) \sin \phi \, d\phi$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{r=-\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega;0,\mu)} P_j^{|k|} \left(\cos \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2} \right) \right) K_{n+1}^* \left(0, \mu; t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}, \vartheta \right) \\
&\quad \times \sin \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2} \right)
\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}
&\int_{-\pi}^{\pi} e^{ik\psi} K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho) d\psi \\
&= \sum_{s=-\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} \lambda_s^{(\omega;-\pi,\pi)} e^{ikt_s^{(\omega;-\pi,\pi)}} K_n^*(-\pi, \pi; t_s^{(\omega;-\pi,\pi)}, \varrho)
\end{aligned}$$

gelten. Damit ist

$$\begin{aligned}
&\int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} \\
&\quad \left(\int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\mu} P(\phi, \psi) K_n^*(\mu; (\phi, \psi), (\vartheta, \varrho)) \sin \phi d\phi d\psi \right) d\vartheta d\varrho \\
&= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} \left(\sum_{j=0}^n \sum_{k=-j}^j a_{jk} \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \right. \\
&\quad \times \sum_{r=-\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil} \sum_{s=-\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega;0,\mu)} \lambda_s^{(\omega;-\pi,\pi)} P_j^{|k|} \left(\cos \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2} \right) \right) \\
&\quad \times \sin \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2} \right) e^{ikt_s^{(\omega;-\pi,\pi)}} K_{n+1}^* \left(0, \mu; t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}, \vartheta \right) \\
&\quad \left. \times K_n^*(-\pi, \pi; t_s^{(\omega;-\pi,\pi)}, \varrho) \right) d\vartheta d\varrho \\
&= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} \left(\sum_{r=-\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil, r \neq 0}^{\lceil \frac{2n+3}{2} \rceil} \sum_{s=-\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil, s \neq 0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} \lambda_r^{(\omega;0,\mu)} \right. \\
&\quad \times \lambda_s^{(\omega;-\pi,\pi)} P \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}, t_s^{(\omega;-\pi,\pi)} \right) \\
&\quad \left. \times K_n^* \left(\mu; \left(t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}, t_s^{(\omega;-\pi,\pi)} \right), (\vartheta, \varrho) \right) \right) d\vartheta d\varrho.
\end{aligned}$$

Vertauschen von Summation und Integration liefert das Ergebnis. ■

Bemerkung 2.16 Wir möchten zur Vereinfachung eine Umindizierung der Gewichte $w_{r,s}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ aus (2.21) und Knoten $(\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)})$ aus (2.20),

$$\begin{aligned}
r &= -\lceil (2n+3)/2 \rceil, \dots, -1, 1, \dots, \lceil (2n+3)/2 \rceil, \\
s &= -\lceil (2n+1)/2 \rceil, \dots, -1, 1, \dots, \lceil (2n+1)/2 \rceil,
\end{aligned}$$

vornehmen. Vereinfachend können wir $\lceil(2n+3)/2\rceil = n+2$ und $\lceil(2n+1)/2\rceil = n+1$ schreiben. Wir führen die Indizes \hat{r} und \hat{s} ein, wobei $w_{r,s}^{(n,\mu,\alpha,\beta)} = w_{\hat{r},\hat{s}}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ und $(\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)}) = (\chi_{\hat{r}}^{(n,\mu)}, \psi_{\hat{s}}^{(n)})$ mit

$$\hat{r} := \begin{cases} r + (n+2) + 1, & \text{falls } r = -(n+2), \dots, -1, \\ r + (n+2), & \text{falls } r = 1, \dots, n+2, \end{cases}$$

$$\hat{s} := \begin{cases} s + (n+1) + 1, & \text{falls } s = -(n+1), \dots, -1, \\ s + (n+1), & \text{falls } s = 1, \dots, n+1, \end{cases}$$

sei. Also durchläuft \hat{r} die Zahlen $1, 2, \dots, 2(n+2)$ und \hat{s} die Zahlen $1, 2, \dots, 2(n+1)$. Als Nächstes wollen wir die Doppelindizierung in eine Einfachindizierung umwandeln. Dabei sei

$$w_k^{(n,\mu,\alpha,\beta)} = w_{\hat{r},\hat{s}}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$$

und

$$(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k := (\sin \chi_{\hat{r}}^{(n,\mu)} \cos \psi_{\hat{s}}^{(n)}, \sin \chi_{\hat{r}}^{(n,\mu)} \sin \psi_{\hat{s}}^{(n)}, \cos \chi_{\hat{r}}^{(n,\mu)})^\top$$

mit

$$k = 2(n+1)(\hat{r}-1) + \hat{s}.$$

Der Index k nimmt die Werte $1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$ an.

Zu berechnen bleibt das Integral

$$I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}(\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)}) \quad (2.22)$$

$$:= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} / \cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} K_n^*(\mu; (\chi_r^{(n,\mu)}, \psi_s^{(n)}), (\vartheta, \varrho)) \, d\vartheta \, d\varrho$$

aus (2.21). Dabei hilft das nächste Korollar. Die Quadraturformeln über einen Kreisbogen für verschiedene Gewichtsfunktionen erhalten wir direkt aus Satz 2.1.

Korollar 2.17 *Es sei das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken P'_1, P'_2 und X_0 aus (2.16) und die Konstante $T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}$ aus (2.15) gegeben. Der Winkel δ sei definiert als $\delta := \frac{\beta-\alpha}{2}$ mit dem äquatorialen Winkel α der Ecke P'_1 und dem äquatorialen Winkel β der Ecke P'_2 (siehe (2.16)).*

Bei gegebener Gewichtsfunktion

$$W_0(\delta; x) := \begin{cases} (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + x^2)^{-\lfloor(n+1)/2\rfloor} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

gilt für alle $T \in \mathbb{H}_{2n+1}$ die Quadraturformel

$$\int_{-\delta}^{\delta} T(\eta) \left(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta \right)^{-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} d\eta = \sum_{j=-(n+1), j \neq 0}^{n+1} \lambda_j^{(W_0; -\delta, \delta)} T(t_j^{(W_0; -\delta, \delta)}) \quad (2.23)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(W_0; -\delta, \delta)} = \lambda_{-j}^{(W_0; -\delta, \delta)} = \int_{\cos \delta}^1 \ell_j^2(x) W_0(\delta; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, n+1$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(W_0; -\delta, \delta)} = -t_{-j}^{(W_0; -\delta, \delta)} = \arccos x_j^{(W_0; -\delta, \delta)}$, wobei $x_j^{(W_0; -\delta, \delta)}$ die Nullstellen des Polynoms $p_{n+1}^{(W_0; \cos \delta, 1)}$ aus (2.2) sind.

Bei gegebener Gewichtsfunktion

$$W_1(\delta; x) := \begin{cases} (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + x^2)^{-\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1/2} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

gilt für alle $T \in \mathbb{H}_{2n+1}$ die Quadraturformel

$$\int_{-\delta}^{\delta} T(\eta) \left(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta \right)^{-\lfloor \frac{n+2}{2} \rfloor + \frac{1}{2}} d\eta = \sum_{j=-(n+1), j \neq 0}^{n+1} \lambda_j^{(W_1; -\delta, \delta)} T(t_j^{(W_1; -\delta, \delta)}) \quad (2.24)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(W_1; -\delta, \delta)} = \lambda_{-j}^{(W_1; -\delta, \delta)} = \int_{\cos \delta}^1 \ell_j^2(x) W_1(\delta; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, n+1$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(W_1; -\delta, \delta)} = -t_{-j}^{(W_1; -\delta, \delta)} = \arccos x_j^{(W_1; -\delta, \delta)}$, wobei $x_j^{(W_1; -\delta, \delta)}$ die Nullstellen des Polynoms $p_{n+1}^{(W_1; \cos \delta, 1)}$ aus (2.2) sind.

Bei gegebener Gewichtsfunktion

$$W_2(\delta; x) := \begin{cases} \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/x) (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

gilt für alle $T \in \mathbb{H}_n$ die Quadraturformel

$$\int_{-\delta}^{\delta} T(\eta) \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \eta) d\eta = \sum_{j=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(W_2; -\delta, \delta)} T(t_j^{(W_2; -\delta, \delta)}) \quad (2.25)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(W_2; -\delta, \delta)} = \lambda_{-j}^{(W_2; -\delta, \delta)} = \int_{\cos \delta}^1 \ell_j^2(x) W_2(\delta; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, \lceil \frac{n+1}{2} \rceil$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(W_2; -\delta, \delta)} = -t_{-j}^{(W_2; -\delta, \delta)} = \arccos x_j^{(W_2; -\delta, \delta)}$, wobei $x_j^{(W_2; -\delta, \delta)}$ die Nullstellen des Polynoms $p_{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil}^{(W_2; \cos \delta, 1)}$ aus (2.2) sind.

Es sei die Gewichtsfunktion

$$\omega(-\delta, \delta; x) := \begin{cases} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

gegeben. Für alle trigonometrischen Polynome $T \in \mathbb{H}_n$ gilt die Quadraturformel

$$\int_{-\delta}^{\delta} T(\eta) d\eta = \sum_{j=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, j \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(\omega; -\delta, \delta)} T(t_j^{(\omega; -\delta, \delta)}) \quad (2.26)$$

mit den Gewichten $\lambda_j^{(\omega; -\delta, \delta)} = \lambda_{-j}^{(\omega; -\delta, \delta)} = \int_{\cos \delta}^1 \ell_j^2(x) \omega(-\delta, \delta; x) dx$, $j = 1, 2, \dots, \lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor$, aus (2.3) und den Knoten $t_j^{(\omega; -\delta, \delta)} = -t_{-j}^{(\omega; -\delta, \delta)} = \arccos x_j^{(\omega; -\delta, \delta)}$ mit den Nullstellen $x_j^{(\omega; -\delta, \delta)}$ des Polynoms $p_{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}^{(\omega; \cos \delta, 1)}$ aus (2.2).

Desweiteren erfolgt die Definition zweier trigonometrischer Polynome zur Berechnung des Integrals $I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}$ aus (2.22).

Definition 2.18 *Es sei $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ das sphärische Dreieck mit den Ecken P'_1 , P'_2 und X_0 , und μ sei der polare Winkel der Ecken P'_1 und P'_2 (siehe (2.16)). Es seien die Konstante $T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}$ aus (2.15) und das trigonometrische Polynom $K_{n+1}^*(0, \mu; \circ, \circ)$ aus (2.12) gegeben. Die Funktionen Q_0 und Q_1 seien definiert als*

$$Q_0(\phi, \eta) := - \sum_{l=-\lfloor (n+1)/2 \rfloor, l \neq 0}^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} c_{2l}(\phi) \frac{i}{2l} \left(\frac{(\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta)^{l - \lfloor (n+1)/2 \rfloor}} - (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta)^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} \right), \quad (2.27)$$

$$Q_1(\phi, \eta) := - \sum_{l=-\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1}^{\lfloor (n+2)/2 \rfloor} c_{2l-1}(\phi) \frac{i}{(2l-1)} \times \frac{(\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l-1}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta)^{l - \lfloor (n+2)/2 \rfloor}} \quad (2.28)$$

mit den Koeffizienten

$$c_l(\phi) := \frac{1}{2n+3} \sum_{k=0}^{2n+2} K_{n+1}^* \left(0, \mu; \phi, \frac{2\pi k}{2n+3} \right) e^{-il2\pi k/(2n+3)}, \quad (2.29)$$

$$l = -(n+1), \dots, n+1.$$

Außerdem sei

$$C(\phi) := - \sum_{l=-\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1}^{\lfloor (n+2)/2 \rfloor} c_{2l-1}(\phi) \frac{i}{(2l-1)}. \quad (2.30)$$

Da

$$(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta) = (\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})(\cos \eta - iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}),$$

gelten die Gleichungen

$$\begin{aligned} & \frac{(\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta)^{l - \lfloor (n+1)/2 \rfloor}} \\ &= (\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{l + \lfloor (n+1)/2 \rfloor} (\cos \eta - iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor - l}, \\ l &= -\lfloor (n+1)/2 \rfloor, \dots, -1, 1, \dots, \lfloor (n+1)/2 \rfloor, \end{aligned}$$

bzw.

$$\begin{aligned} & \frac{(\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l-1}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \eta)^{l - \lfloor (n+2)/2 \rfloor}} \\ &= (\cos \eta + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{l + \lfloor (n+2)/2 \rfloor - 1} (\cos \eta - iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{\lfloor (n+2)/2 \rfloor - l}, \\ l &= -\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1, \dots, \lfloor (n+2)/2 \rfloor. \end{aligned}$$

Diese Umformungen verdeutlichen, dass die Funktion Q_0 ein trigonometrisches Polynom in η vom Höchstgrad $2\lfloor (n+1)/2 \rfloor$ und Q_1 ein trigonometrisches Polynom in η vom Höchstgrad $2\lfloor (n+2)/2 \rfloor - 1$ ist. Wie wir das Integral aus (2.22) berechnen können, zeigt uns der folgende Hauptsatz für die Darstellung der Gewichte aus (2.21).

Satz 2.19 *Es sei das sphärische Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ mit den Ecken P'_1, P'_2 und X_0 aus (2.16) und der Konstanten $T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}$ aus (2.15) gegeben. Es sei δ der Winkel $\delta = \frac{\beta - \alpha}{2}$ mit dem äquatorialen Winkel α der Ecke P'_1 und dem äquatorialen Winkel β der Ecke P'_2 (siehe (2.16)). Ferner sei $K_n^*(\mu; (\circ, \circ), (\circ, \circ)) = K_{n+1}^*(0, \mu; \circ, \circ)K_n^*(-\pi, \pi; \circ, \circ)$ das trigonometrische Polynom aus (2.13) und Q_0 und Q_1 trigonometrische Polynome aus (2.27) und (2.28). Es seien außerdem die Werte c_l aus (2.29) und C aus (2.30) gegeben.*

Für das folgende Integral über $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ gilt dann

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} K_n^*(\mu; \mathbf{x}, (\phi, \psi)) d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha + \beta}{2}))} K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho) d\vartheta d\varrho \\ &= \sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_0; -\delta, \delta)} Q_0(\phi, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}) K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \\ &+ \sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_1; -\delta, \delta)} Q_1(\phi, t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}) K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, t_k^{(W_1; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \\ &+ c_0(\phi) \sum_{k=-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor, k \neq 0}^{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} \lambda_k^{(W_2; -\delta, \delta)} K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, t_k^{(W_2; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \\ &- C(\phi) \sum_{k=-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor, k \neq 0}^{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} \lambda_k^{(\omega; -\delta, \delta)} K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, t_k^{(\omega; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2}\right). \end{aligned}$$

Die Gewichte $\lambda_k^{(W_0; -\delta, \delta)}$, $\lambda_k^{(W_1; -\delta, \delta)}$, $\lambda_k^{(W_2; -\delta, \delta)}$ und $\lambda_k^{(\omega; -\delta, \delta)}$ und Knoten $t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}$, $t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}$, $t_k^{(W_2; -\delta, \delta)}$ und $t_k^{(\omega; -\delta, \delta)}$ sind diejenigen aus Korollar 2.17.

Beweis. Zuerst ersetzen wir im Integral

$$\begin{aligned} & I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}(\phi, \psi) \\ &= \int_{\alpha}^{\beta} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos(\varrho - \frac{\alpha + \beta}{2}))} K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho) d\vartheta d\varrho \end{aligned}$$

ϱ durch $\tau + \frac{\alpha+\beta}{2}$ und erhalten das Integral

$$\begin{aligned} I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}(\phi, \psi) &= \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos\tau)} K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, \tau + \frac{\alpha+\beta}{2}\right) d\vartheta d\tau. \end{aligned}$$

Für feste Winkel ϕ und ψ seien die trigonometrischen Polynome $Q \in \mathbb{H}_{n+1}$ und $P \in \mathbb{H}_n$ definiert als

$$Q(\vartheta) := K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) \quad (2.31)$$

und

$$P(\tau) := K_n^*\left(-\pi, \pi; \psi, \tau + \frac{\alpha+\beta}{2}\right).$$

Daher können wir verkürzt schreiben

$$I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} = \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos\tau)} Q(\vartheta) P(\tau) d\vartheta d\tau. \quad (2.32)$$

Wir drücken das trigonometrische Polynom Q als Fourier-Summe

$$\begin{aligned} Q(\vartheta) &= \sum_{l=-(n+1)}^{n+1} c_l e^{il\vartheta} \\ &= c_0 + \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il\vartheta} + \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i\vartheta} \end{aligned} \quad (2.33)$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$c_l := c_l(\phi) = \frac{1}{2n+3} \sum_{k=0}^{2n+2} Q\left(\frac{2\pi k}{2n+3}\right) e^{-il2\pi k/(2n+3)}, \quad l = -(n+1), \dots, n+1,$$

aus (2.29) aus.

Da

$$\begin{aligned} Q(\vartheta + \pi) &= c_0 + \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il(\vartheta+\pi)} + \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i(\vartheta+\pi)} \\ &= c_0 + \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il\vartheta} - \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i\vartheta} \end{aligned}$$

ist, gelten die Beziehungen

$$\frac{Q(\vartheta) + Q(\vartheta + \pi) - 2c_0}{2} = \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il\vartheta}$$

und

$$\frac{Q(\vartheta) - Q(\vartheta + \pi)}{2} = \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i\vartheta}.$$

Mit den Umformungen

$$\begin{aligned} \sin(\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)) &= \frac{T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau}{\sqrt{1 + T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos^2 \tau}}, \\ \cos(\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)) &= \frac{1}{\sqrt{1 + T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos^2 \tau}} \end{aligned}$$

(siehe [35, S. 71]) können wir, da $-(\beta - \alpha)/2 \leq \tau \leq (\beta - \alpha)/2$ und $0 < \beta - \alpha < \pi$ ist und daraus $\cos \tau > 0$ folgt, die Gleichheit

$$e^{i \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} = \frac{\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{1/2}} \quad (2.34)$$

zeigen. Diese benutzen wir, um das innere Integral aus (2.32) für den zweiten Summanden der Fourier-Summe aus (2.33) zu berechnen. Wir erhalten als Ergebnis

$$\begin{aligned} &\int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il\vartheta} d\vartheta \\ &= \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} \frac{1}{2il} (e^{2il \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} - 1) \\ &= - \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} \frac{i}{2l} \left(\frac{(\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^l} - 1 \right). \end{aligned}$$

Aus dieser Summe ziehen wir den Faktor $1/(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor}$ heraus, so dass

$$\begin{aligned} &\int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} e^{2il\vartheta} d\vartheta \\ &= - \frac{1}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor}} \\ &\quad \times \sum_{l=-\lfloor(n+1)/2\rfloor, l \neq 0}^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} c_{2l} \frac{i}{2l} \left(\frac{(\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{l-\lfloor(n+1)/2\rfloor}} \right. \\ &\quad \left. - (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor} \right) \\ &= \frac{Q_0(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor}} \quad (2.35) \end{aligned}$$

mit dem trigonometrischen Polynom $Q_0(\tau) = Q_0(\phi, \tau) \in \mathbb{H}_{2\lfloor(n+1)/2\rfloor}$ aus (2.27) ist. Im nächsten Schritt berechnen wir das innere Integral aus (2.32) für den dritten Summanden der Fourier-Summe aus (2.33) und erhalten unter Verwendung der Identität (2.34) die Gleichung

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i\vartheta} d\vartheta \\
&= \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} \frac{1}{(2l-1)i} \left(\left(\frac{\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{1/2}} \right)^{2l-1} - 1 \right) \\
&= - \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} \frac{i}{(2l-1)} \left(\frac{\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{1/2}} \right)^{2l-1} \\
&\quad + \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} \frac{i}{(2l-1)}.
\end{aligned}$$

Nachdem wir den Faktor $1/(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \phi)^{\lfloor(n+2)/2\rfloor-1/2}$ aus dem ersten Summanden herausgezogen haben, zeigt sich, dass

$$\begin{aligned}
& \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} e^{(2l-1)i\vartheta} d\vartheta \\
&= \frac{1}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+2)/2\rfloor-1/2}} \\
&\quad \times \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} \frac{i}{(2l-1)} \frac{(\cos \tau + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2l-1}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{l-\lfloor(n+2)/2\rfloor}} \\
&\quad + \sum_{l=-\lfloor(n+2)/2\rfloor+1}^{\lfloor(n+2)/2\rfloor} c_{2l-1} \frac{i}{(2l-1)} \\
&= \frac{Q_1(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+2)/2\rfloor-1/2}} - C
\end{aligned} \tag{2.36}$$

mit dem trigonometrischen Polynom $Q_1(\tau) = Q_1(\phi, \tau) \in \mathbb{H}_{2\lfloor(n+2)/2\rfloor-1}$ aus (2.28) und der Konstanten $C := C(\tau)$ aus (2.30) ist.

Das innere Integral aus (2.32) für den ersten Summanden der Fourier-Summe aus (2.33) muss nun noch berechnet werden. Für dieses Integral ergibt sich

$$c_0 \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau)} d\tau = c_0 \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos \tau).$$

Als Nächstes erfolgt die Bestimmung der äußeren Integrale aus (2.32) für die einzelnen Summanden der Fourier-Summe aus (2.33), und zwar der Integrale

$$\int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \frac{P(\tau)Q_0(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 \tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor}} d\tau,$$

$$\int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \frac{P(\tau)Q_1(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2\tau)^{\lfloor(n+2)/2\rfloor-1/2}} d\tau - C \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} P(\tau) d\tau$$

und

$$c_0 \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} P(\tau) \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos\tau) d\tau.$$

Im ersten Integral finden wir im Integranden das trigonometrische Polynom $PQ_0 \in \mathbb{H}_{n+2\lfloor(n+1)/2\rfloor}$. Somit erhalten wir mit der Quadraturformel (2.23) die Gleichung

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \frac{P(\tau)Q_0(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2\tau)^{\lfloor(n+1)/2\rfloor}} d\tau \\ &= \sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_0; -\delta, \delta)} P(t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}) Q_0(t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}), \end{aligned}$$

wobei $\lceil(n+2\lfloor(n+1)/2\rfloor+1)/2\rceil = \lceil n/2\rceil + \lfloor(n+1)/2\rfloor + 1 = \lceil n/2\rceil + \lfloor n/2\rfloor + 1 = n+1$ ist. In der Summe haben wir im ersten Integral das trigonometrische Polynom $PQ_1 \in \mathbb{H}_{n+2\lfloor(n+2)/2\rfloor-1}$ als Integranden und wenden die Quadraturformel (2.24) an. Mit der Formel (2.26) für trigonometrische Polynome aus \mathbb{H}_n , angewandt auf das zweite Integral, gilt dann

$$\begin{aligned} & \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} \frac{P(\tau)Q_1(\tau)}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2\tau)^{\lfloor(n+2)/2\rfloor-1/2}} d\tau - C \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} P(\tau) d\tau \\ &= \sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_1; -\delta, \delta)} P(t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}) Q_1(t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}) \\ & \quad - C \sum_{k=-\lceil\frac{n+1}{2}\rceil, k \neq 0}^{\lceil\frac{n+1}{2}\rceil} \lambda_k^{(\omega; -\delta, \delta)} P(t_k^{(\omega; -\delta, \delta)}), \end{aligned}$$

wobei $\lceil(n+2\lfloor(n+2)/2\rfloor-1+1)/2\rceil = \lceil(n+2\lfloor n/2\rfloor+2)/2\rceil = \lceil n/2\rceil + \lfloor n/2\rfloor + 1 = n+1$ gilt.

Die Quadraturformel (2.25) liefert schließlich den Zusammenhang

$$\begin{aligned} & c_0 \int_{-\frac{\beta-\alpha}{2}}^{\frac{\beta-\alpha}{2}} P(\tau) \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/\cos\tau) d\tau \\ &= c_0 \sum_{k=-\lceil\frac{n+1}{2}\rceil, k \neq 0}^{\lceil\frac{n+1}{2}\rceil} \lambda_k^{(W_2; -\delta, \delta)} P(t_k^{(W_2; -\delta, \delta)}). \end{aligned}$$

■

2.2.2 Quadraturformel über ein beliebiges sphärisches Dreieck

Ein beliebiges Spherical Harmonic $P \in \mathbb{V}_n$ soll über ein beliebiges sphärisches Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ exakt integriert werden. Wir haben mit den Sätzen 2.15 und 2.19 eine Quadraturformel über gleichschenklige sphärische Dreiecke mit den Ecken aus (2.16) kennengelernt und wollen diese für den allgemeinen Fall nutzen. Dazu verschieben wir das Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ so an den Nordpol, dass der Mittelpunkt des Umkreises $c(P_1, P_2, P_3)$ auf den Nordpol X_0 abgebildet wird. Die Drehung beschreiben wir mit der Drehmatrix \mathbf{M} . Das verschobene Dreieck $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ liegt in der sphärischen Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$, $\mu = d(c(P_1, P_2, P_3), P_k)$, $k = 1, 2, 3$. Der Umkreis $U(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ des Dreiecks entspricht der Grenze der sphärischen Kappe. Liegen alle Ecken des Dreiecks auf demselben Großkreis, dann fallen dieser Großkreis und der Dreiecksumkreis zusammen, und er liegt nach dem Verschieben des Dreiecks in der x - y -Ebene, d. h. die Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ hat den Radius $\mu = \pi/2$ und entspricht der nördlichen Hemisphäre. Im Folgenden betrachten wir Dreiecke, deren Ecken nicht auf einem gemeinsamen Großkreis liegen. Der Radius der entsprechenden sphärischen Kappen $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ ist kleiner als $\pi/2$. Für die Ecken des an den Nordpol verschobenen Dreiecks $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ gelte

$$\begin{aligned}\hat{P}_1 &= (\sin \mu \cos \alpha', \sin \mu \sin \alpha', \cos \mu)^\top = \mathbf{M}^\top P_1, \\ \hat{P}_2 &= (\sin \mu \cos \beta', \sin \mu \sin \beta', \cos \mu)^\top = \mathbf{M}^\top P_2, \\ \hat{P}_3 &= (\sin \mu \cos \nu', \sin \mu \sin \nu', \cos \mu)^\top = \mathbf{M}^\top P_3,\end{aligned}$$

$0 < \mu < \pi/2$, $-\pi \leq \alpha' < \pi$, $-\pi \leq \beta' < \pi$, $-\pi \leq \nu' < \pi$. Falls es erforderlich ist, nehmen wir eine Umbenennung der Ecken in der Art vor, dass

$$\begin{aligned}\hat{P}_1 &= (\sin \mu \cos \hat{\alpha}, \sin \mu \sin \hat{\alpha}, \cos \mu)^\top, \\ \hat{P}_2 &= (\sin \mu \cos \hat{\beta}, \sin \mu \sin \hat{\beta}, \cos \mu)^\top, \\ \hat{P}_3 &= (\sin \mu \cos \hat{\nu}, \sin \mu \sin \hat{\nu}, \cos \mu)^\top\end{aligned}$$

mit den Winkeln $\hat{\alpha} = \min(\alpha', \beta', \nu')$, $\hat{\nu} = \max(\alpha', \beta', \nu')$ ist. Es gilt dann also $-\pi \leq \hat{\alpha} < \hat{\beta} < \hat{\nu} < \pi$. Natürlich ist

$$\begin{aligned}\hat{P}_1 &= (\sin \mu \cos(\hat{\alpha} + 2\pi), \sin \mu \sin(\hat{\alpha} + 2\pi), \cos \mu)^\top, \\ \hat{P}_2 &= (\sin \mu \cos(\hat{\beta} + 2\pi), \sin \mu \sin(\hat{\beta} + 2\pi), \cos \mu)^\top, \\ \hat{P}_3 &= (\sin \mu \cos(\hat{\nu} + 2\pi), \sin \mu \sin(\hat{\nu} + 2\pi), \cos \mu)^\top\end{aligned}$$

und $-\pi \leq \hat{\alpha} < \hat{\beta} < \hat{\nu} < \pi \leq \hat{\alpha} + 2\pi < \hat{\beta} + 2\pi < \hat{\nu} + 2\pi < 3\pi$.

Der Nordpol X_0 liegt dann innerhalb des Dreiecks $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$, falls

$$\hat{\nu} > \hat{\alpha} + \pi, \quad \hat{\beta} < \hat{\alpha} + \pi \quad \text{und} \quad \hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi.$$

Aus $\hat{\nu} > \hat{\alpha} + \pi$ folgt $\hat{\alpha} + 2\pi - \hat{\nu} < \pi$. Die Länge aller Großkreisstücke zwischen den Ecken ist kleiner π . In diesem Fall können wir das Dreieck $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ in drei gleichschenklige Teildreiecke $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)$, $\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)$ und $\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)$ aufteilen und schreiben

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x})$$

$$= \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}).$$

Für diese drei Dreiecke erhalten wir mit den Sätzen 2.15 und 2.19 die Quadraturgewichte

$$w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)}, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

und die Quadraturknoten

$$(\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

die nur von dem Polynomgrad n und dem Radius μ abhängen und daher für alle drei Dreiecke gleich sind. Sie stellen die Knoten unserer gesuchten Quadraturformel dar. Die zugehörigen Gewichte sind $w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)}$, d. h.

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)}) P((\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k), \end{aligned}$$

und damit gilt

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k). \end{aligned}$$

Ist $\hat{\nu} < \hat{\alpha} + \pi$ und folglich $\hat{\beta} < \hat{\nu} < \hat{\alpha} + \pi$ und $\hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$, dann liegt X_0 außerhalb der Grenzen des Dreiecks $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$, und wir nehmen die Aufteilung

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) - \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

vor. Die Sätze 2.15 und 2.19 liefern die Quadraturgewichte

$$w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\nu})}, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

und die Quadraturknoten

$$(\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1).$$

Dann gilt mit diesen Knoten und den Gewichten $w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} - w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\nu})}$ die Gleichheit

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} - w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\nu})}) P((\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k), \end{aligned}$$

und für das Integral über das sphärische Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ ist

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\beta})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} - w_k^{(n, \mu, \hat{\alpha}, \hat{\nu})}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k). \end{aligned}$$

Der Nordpol X_0 liegt auch dann außerhalb des Dreiecks $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$, falls $\hat{\beta} > \hat{\alpha} + \pi$ und folglich $\hat{\nu} > \hat{\beta} > \hat{\alpha} + \pi$ und $\hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$ ist. Dies impliziert $\hat{\alpha} + 2\pi - \hat{\beta} < \pi$ und $\hat{\alpha} + 2\pi - \hat{\nu} < \pi$. Wir können zur Darstellung

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) - \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

gelangen. Mit den Sätzen 2.15 und 2.19 erhalten wir für diese Teilintegrale die Quadraturgewichte

$$w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)}, \quad w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\alpha} + 2\pi)}, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

und die Quadraturknoten

$$(\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1).$$

Mit diesen Quadraturknoten und den Quadraturgewichten $w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)} - w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\alpha} + 2\pi)}$ gilt

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)} - w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\alpha} + 2\pi)}) P((\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k), \end{aligned}$$

und folglich ist

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} + w_k^{(n, \mu, \hat{\nu}, \hat{\alpha} + 2\pi)} - w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\alpha} + 2\pi)}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k). \end{aligned}$$

Gesetzt den Fall, dass $\hat{\nu} - \hat{\beta} > \pi$, $\hat{\beta} < \hat{\alpha} + \pi$ und $\hat{\nu} > \hat{\alpha} + \pi$ ist, also $\hat{\beta} + 2\pi - \hat{\nu} < \pi$, $\hat{\beta} - \hat{\alpha} < \pi$ und $\hat{\alpha} + 2\pi - \hat{\nu} < \pi$, dann befindet sich der Nordpol ebenfalls außerhalb des Dreiecks $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$, und mit

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) - \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

erhalten wir drei Integrale, für die die Sätze 2.15 und 2.19 die Quadraturgewichte

$$w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)}, \quad w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})}, \quad w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\beta}+2\pi)}, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

und die Quadraturknoten

$$(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k, \quad k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1),$$

liefern. Mit diesen Knoten und den Gewichten $w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} - w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\beta}+2\pi)}$ ist

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} - w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\beta}+2\pi)}) P((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k), \end{aligned}$$

und äquivalent dazu gilt

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} - w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\beta}+2\pi)}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k). \end{aligned}$$

Der Nordpol liegt auf der Dreiecksseite zwischen den Ecken \hat{P}_1 und \hat{P}_3 , falls $\hat{\nu} = \hat{\alpha} + \pi$. Folglich gilt $\hat{\beta} < \hat{\nu} = \alpha + \pi$ und $\hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$. Das Integral lässt sich in zwei Teilintegrale aufteilen,

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}).$$

Mit den Knoten $(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k$ und den Gewichten $w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})}$, $k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$, erhalten wir die Quadraturformel

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})}) P((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k)$$

und gelangen so zur Quadratur

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k).$$

Auf der Dreiecksseite, die die Ecken \hat{P}_1 und \hat{P}_2 aufspannen, liegt der Nordpol, falls $\hat{\beta} = \hat{\alpha} + \pi$. Damit ist $\hat{\nu} > \hat{\beta} = \alpha + \pi$ und $\hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$. Das Integral lässt sich in zwei Teilintegrale aufteilen,

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \int_{\Delta(\hat{P}_2, \hat{P}_3, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}).$$

Die Knoten $(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k$ und Gewichte $w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)}$, $k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$, gehören zur Quadraturformel

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)}) P((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k),$$

und wir erhalten die Quadratur

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})} + w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k).$$

Ist $\hat{\nu} = \hat{\beta} + \pi$, dann liegt der Nordpol X_0 auf der Dreiecksseite zwischen den Ecken \hat{P}_2 und \hat{P}_3 . In diesem Fall gilt $\hat{\beta} < \hat{\alpha} + \pi$ und $\hat{\nu} > \hat{\alpha} + \pi$, und wir nehmen die Aufteilung

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \int_{\Delta(\hat{P}_3, \hat{P}_1, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) + \int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, X_0)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x})$$

vor. Die Quadraturformel lautet dann

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})}) P((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k)$$

mit den Knoten $(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k$ und den Gewichten $w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})}$, $k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$, und damit gilt

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} (w_k^{(n,\mu,\hat{\nu},\hat{\alpha}+2\pi)} + w_k^{(n,\mu,\hat{\alpha},\hat{\beta})}) P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k).$$

Ein besonderer Fall liegt vor, wenn $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ ein gleichschenkliges Dreieck ist. Ist $d(P_1, P_2) = d(P_1, P_3)$, dann können wir das Dreieck auch so verschieben, dass P_1 auf den Nordpol X_0 abgebildet wird. Das verschobene Dreieck $\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)$ liegt in einer sphärischen Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ mit Radius $\mu = d(P_1, P_2) = d(P_1, P_3)$. Für die Dreiecksecken gelte

$$\begin{aligned} \hat{P}_1 &= (0, 0, 1)^\top, \\ \hat{P}_2 &= (\sin \mu \cos \hat{\beta}, \sin \mu \sin \hat{\beta}, \cos \mu)^\top, \\ \hat{P}_3 &= (\sin \mu \cos \hat{\nu}, \sin \mu \sin \hat{\nu}, \cos \mu)^\top \end{aligned}$$

mit den Winkeln $\hat{\beta}$, $-\pi \leq \hat{\beta} < \pi$, und $\hat{\nu}$, $-\pi \leq \hat{\nu} < \pi$.

Ist $0 < \hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$, dann erhalten wir mit den Knoten $(\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k$ und den Gewichten $w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})}$, $k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$, die Quadraturformel

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_k^{(n,\mu,\hat{\beta},\hat{\nu})} P((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_k),$$

und folglich ist

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu})} P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k).$$

Ist $0 \leq \hat{\beta} < \pi$, $-\pi \leq \hat{\nu} < 0$ und $2\pi + \hat{\nu} - \hat{\beta} < \pi$, dann bestimmen wir die Gewichte $w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu} + 2\pi)}$, $k = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1)$, und es gilt die Gleichheit

$$\int_{\Delta(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \hat{P}_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu} + 2\pi)} P((\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k).$$

Somit ist

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{M}\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_k^{(n, \mu, \hat{\beta}, \hat{\nu} + 2\pi)} P((\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)})_k).$$

2.2.3 Drehung eines sphärischen Dreiecks

Die Drehung eines beliebigen sphärischen Dreiecks $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ an den Nordpol X_0 der Sphäre, so dass der Mittelpunkt $c(P_1, P_2, P_3)$ des Dreiecksumkreises auf den Nordpol abgebildet wird und somit die Ecken des verschobenen Dreiecks $\Delta(P'_1, P'_2, P'_3)$ auf dem Rand der Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ liegen, sei durch die Drehmatrix \mathbf{M}^\top beschrieben. Die Sätze 2.15 und 2.19 liefern eine Quadraturformel über gleichschenklige sphärische Dreiecke mit den Ecken aus (2.16). Wir haben gezeigt, wie wir diesen Spezialfall auf beliebige sphärische Dreiecke $\Delta(P'_1, P'_2, P'_3)$ erweitern können. Wir wollen im Folgenden die Berechnung der Einträge der Drehmatrix

$$\mathbf{M}^\top = \begin{pmatrix} m_{1,1} & m_{1,2} & m_{1,3} \\ m_{2,1} & m_{2,2} & m_{2,3} \\ m_{3,1} & m_{3,2} & m_{3,3} \end{pmatrix}$$

beschreiben. Die berechneten Quadraturknoten $\mathbf{x}^{(n, \mu)}$ für Polynomgrad n in der sphärischen Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(X_0)$ lassen sich mit der Drehmatrix \mathbf{M} zurückverschieben, d. h. unsere gesuchten Knoten sind $\mathbf{M}\mathbf{x}^{(n, \mu)}$. Für die Matrix \mathbf{M} gelten die Gleichungen

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^\top P_1 &= P'_1 = (\sin \mu \cos \hat{\alpha}, \sin \mu \sin \hat{\alpha}, \cos \mu)^\top, \\ \mathbf{M}^\top P_2 &= P'_2 = (\sin \mu \cos \hat{\beta}, \sin \mu \sin \hat{\beta}, \cos \mu)^\top, \\ \mathbf{M}^\top P_3 &= P'_3 = (\sin \mu \cos \hat{\nu}, \sin \mu \sin \hat{\nu}, \cos \mu)^\top. \end{aligned}$$

Die Zeilen der Matrix erfüllen also die Gleichungen

$$\begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1,1} \\ m_{1,2} \\ m_{1,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \hat{\alpha} \\ \sin \mu \cos \hat{\beta} \\ \sin \mu \cos \hat{\nu} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{2,1} \\ m_{2,2} \\ m_{2,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin \mu \sin \hat{\alpha} \\ \sin \mu \sin \hat{\beta} \\ \sin \mu \sin \hat{\nu} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{3,1} \\ m_{3,2} \\ m_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \mu \\ \cos \mu \\ \cos \mu \end{pmatrix}.$$

Durch das Lösen dieser drei linearen Gleichungssysteme erhalten wir die Einträge der Matrix \mathbf{M} . Damit wir auf diese Weise \mathbf{M} berechnen können, müssen aber die Winkel $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ und $\hat{\nu}$ bekannt sein. Wir haben festgelegt, dass die Ecken P_1 , P_2 , P_3 gegen den Uhrzeigersinn angeordnet sind. Der Mittelpunkt des Umkreises des Dreiecks ist

$$c(P_1, P_2, P_3) = \frac{(P_2 - P_1) \times (P_3 - P_1)}{\|(P_2 - P_1) \times (P_3 - P_1)\|_2}$$

(vergleiche Kapitel 1.1). Die Kante $G(P_1, P_2)$ beispielsweise liegt auf einem Großkreis, und die Ecken P_1 und P_2 bilden mit dem Ursprung eine Ebene, die die Sphäre in zwei Hemisphären unterteilt. Angenommen wir schauen von der Ecke P_1 aus in Richtung P_2 , dann befindet sich der Kreismittelpunkt $c(P_1, P_2, P_3)$ in der linken Hemisphäre, in der rechten oder auf der Grenze in der Ebene, genauer auf dem Großkreis. Liegt $c(P_1, P_2, P_3)$ in der linken Hemisphäre oder auf der Grenze, dann sei $l(P_1, P_2) = 1$, liegt $c(P_1, P_2, P_3)$ in der rechten Hemisphäre, dann sei $l(P_1, P_2) = 0$. Äquivalent dazu ist

$$l(P_1, P_2) := \begin{cases} 1, & \text{falls } \langle c(P_1, P_2, P_3), P_1 \times P_2 \rangle_2 \geq 0, \\ 0, & \text{falls } \langle c(P_1, P_2, P_3), P_1 \times P_2 \rangle_2 < 0. \end{cases}$$

Der Abstand zwischen den Ecken und dem Umkreismittelpunkt ist

$$\begin{aligned} \mu &= \arccos \langle c(P_1, P_2, P_3), P_1 \rangle_2 = \arccos \langle c(P_1, P_2, P_3), P_2 \rangle_2 \\ &= \arccos \langle c(P_1, P_2, P_3), P_3 \rangle_2. \end{aligned}$$

Wir beschränken uns auf sphärische Dreiecke mit $0 < \mu < \pi/2$. Die Länge des Stückes des Großkreises $G(P_1, P_2)$, also der Kante zwischen P_1 und P_2 , beträgt $d(P_1, P_2) = \arccos \langle P_1, P_2 \rangle_2$, $d(P_1, P_2) \in [0, \pi]$ (vergleiche Kapitel 1.1). Die zwei übrigen Kanten $G(P_2, P_3)$ und $G(P_3, P_1)$ haben die Länge $d(P_2, P_3) = \arccos \langle P_2, P_3 \rangle_2 \in [0, \pi]$ bzw. $d(P_1, P_3) = \arccos \langle P_1, P_3 \rangle_2 \in [0, \pi]$.

Der Winkel β'' gegenüber $G(P_1, P_2)$ zwischen $G(c(P_1, P_2, P_3), P_1)$ und $G(c(P_1, P_2, P_3), P_2)$ genügt dem Halbwinkelsatz (siehe z. B. [35, S. 772])

$$\sin \left(\frac{\beta''}{2} \right) = \frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_1, P_2) \right)}{\sin \mu},$$

d. h.

$$\beta'' = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_1, P_2) \right)}{\sin \mu} \right).$$

Wie wir nun die äquatorialen Winkel $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$ und $\hat{\nu}$ berechnen, hängt von der Lage des Mittelpunktes $c(P_1, P_2, P_3)$ relativ zum Dreieck ab. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit arbeiten wir mit einem festen Winkel $\hat{\alpha}$. Es sei $\hat{\alpha} = -\pi$ und $\hat{\alpha} < \hat{\beta} < \hat{\nu} < \hat{\alpha} + 2\pi$.

Erster Fall: Der Mittelpunkt liegt in dem eben definierten Sinne links zur Kante $G(P_1, P_2)$, links zur Kante $G(P_2, P_3)$, rechts zur Kante $G(P_3, P_1)$ außerhalb des Dreiecks, d. h. $l(P_1, P_2) = 1$, $l(P_2, P_3) = 1$ und $l(P_3, P_1) = 0$. In diesem Fall erhalten wir die Winkel

$$\hat{\beta} = \beta'' - \pi$$

und

$$\hat{\nu} = \hat{\beta} + \nu'',$$

wobei

$$\nu'' = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_2, P_3) \right)}{\sin \mu} \right)$$

der Winkel gegenüber der Kante $G(P_2, P_3)$ zwischen $G(c(P_1, P_2, P_3), V_2)$ und $G(c(P_1, P_2, P_3), V_3)$ ist, bestimmbar mit Hilfe des Halbwinkelsatzes.

Zweiter Fall: Der Mittelpunkt liegt rechts zur Kante $G(P_1, P_2)$, links zur Kante $G(P_2, P_3)$, links zur Kante $G(P_3, P_1)$ außerhalb des Dreiecks, d. h. $l(P_1, P_2) = 0$, $l(P_2, P_3) = 1$ und $l(P_3, P_1) = 1$. In diesem Fall gilt für die Winkel

$$\hat{\beta} = \pi - \beta''$$

und

$$\hat{\nu} = \hat{\beta} + \nu'',$$

wobei

$$\nu'' = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_2, P_3) \right)}{\sin \mu} \right)$$

der Winkel gegenüber der Kante $G(P_2, P_3)$ zwischen $G(c(P_1, P_2, P_3), P_2)$ und $G(c(P_1, P_2, P_3), P_3)$ ist.

Dritter Fall: Der Mittelpunkt liegt links zur Kante $G(P_1, P_2)$, rechts zur Kante $G(P_2, P_3)$, links zur Kante $G(P_3, P_1)$ außerhalb des Dreiecks, d. h. $l(P_1, P_2) = 1$, $l(P_2, P_3) = 0$ und $l(P_3, P_1) = 1$. Wir bestimmen die Winkel

$$\hat{\beta} = \beta'' - \pi$$

und

$$\hat{\nu} = \pi - \nu'',$$

wobei

$$\nu'' = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_3, P_1) \right)}{\sin \mu} \right)$$

der Winkel gegenüber der Kante $G(P_3, P_1)$ zwischen $G(c(P_1, P_2, P_3), P_3)$ und $G(c(P_1, P_2, P_3), P_1)$ ist.

Vierter Fall: Der Mittelpunkt ist Element des Dreiecks, d. h. $l(P_1, P_2) = 1$, $l(P_2, P_3) = 1$ und $l(P_3, P_1) = 1$. Für die Winkel $\hat{\beta}$ und $\hat{\nu}$ gilt

$$\hat{\beta} = \beta'' - \pi$$

und

$$\hat{\nu} = \pi - \nu'',$$

wobei

$$\nu'' = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_3, P_1) \right)}{\sin \mu} \right)$$

der Winkel gegenüber der Kante $G(P_3, P_1)$ zwischen $G(c(P_1, P_2, P_3), P_3)$ und $G(c(P_1, P_2, P_3), P_1)$ ist.

Liegt mit dem Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ ein gleichschenkliges sphärisches Dreieck vor, z. B. mit $d(P_1, P_3) = d(P_2, P_3)$, dann wird das Dreieck so verschoben, dass die Ecke P_3 auf den Nordpol abgebildet wird. Wir lösen die linearen Gleichungssysteme

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{1,1} \\ m_{1,2} \\ m_{1,3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sin \mu \cos \hat{\alpha} \\ \sin \mu \cos \hat{\beta} \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{2,1} \\ m_{2,2} \\ m_{2,3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \sin \mu \sin \hat{\alpha} \\ \sin \mu \sin \hat{\beta} \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} P_1^\top \\ P_2^\top \\ P_3^\top \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{3,1} \\ m_{3,2} \\ m_{3,3} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos \mu \\ \cos \mu \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dabei wählen wir mit $\hat{\alpha} = -\pi$ diesen Winkel fest, und mit $\mu = d(P_2, P_3) = d(P_1, P_3)$ können wir den Winkel

$$\hat{\beta} = \hat{\alpha} + 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{1}{2} d(P_1, P_2) \right)}{\sin \mu} \right)$$

bestimmen.

2.3 Numerische Realisierung der Berechnung der Quadraturformel über ein sphärisches Dreieck

Wir haben in den letzten Kapiteln eine Art Gauß-Quadraturformel über gleichschenklige sphärische Dreiecke mit den Ecken $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ aus (2.16) konstruiert. Wie wir gesehen haben, können wir diese nutzen, um auch Quadraturgewichte und -knoten über allgemeine sphärische Dreiecke $\Delta(P_1, P_2, P_3)$, die beliebig auf der Sphäre lokalisiert sind, zu erhalten. In diesem Kapitel wollen wir zeigen, wie wir die Berechnung dieser Quadratur über ein gleichschenkliges sphärisches Dreieck $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ numerisch realisiert haben.

Als Eingabe unseres Algorithmus erwarten wir neben Polynomgrad n u. a. den polaren Winkel μ und die äquatorialen Winkel α und β der Ecken P'_1 und P'_2 . Zu jedem Dreieck gehört eine Konstante

$$T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} = \tan \mu \cos \left(\frac{\beta - \alpha}{2} \right)$$

aus (2.15). Im Folgenden sei $\delta = (\beta - \alpha)/2$ (vergleiche Korollar 2.17). Die Sätze 2.15 und 2.19 liefern uns für diese speziellen Dreiecke die Quadraturknoten

$$\begin{aligned} (\chi_r^{(n, \mu)}, \psi_s^{(n)}) &:= \left(t_r^{(\omega; 0, \mu)} + \frac{\mu}{2}, t_s^{(\omega; -\pi, \pi)} \right), \\ r &= -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ s &= -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \end{aligned} \quad (2.37)$$

(siehe (2.20) und die Quadraturgewichte

$$\begin{aligned} w_{r,s}^{(n, \mu, \alpha, \beta)} &:= \\ &\lambda_r^{(\omega; 0, \mu)} \lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)} \sin(\chi_r^{(n, \mu)}) \\ &\times \left(\sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_0; -\delta, \delta)} Q_0(\chi_r^{(n, \mu)}, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}) K_n^* \left(-\pi, \pi; \psi_s^{(n)}, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right. \\ &+ \sum_{k=-(n+1), k \neq 0}^{n+1} \lambda_k^{(W_1; -\delta, \delta)} Q_1(\chi_r^{(n, \mu)}, t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}) K_n^* \left(-\pi, \pi; \psi_s^{(n)}, t_k^{(W_1; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \\ &+ c_0(\chi_r^{(n, \mu)}) \sum_{k=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, k \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_k^{(W_2; -\delta, \delta)} K_n^* \left(-\pi, \pi; \psi_s^{(n)}, t_k^{(W_2; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \\ &\left. - C(\chi_r^{(n, \mu)}) \sum_{k=-\lceil \frac{n+1}{2} \rceil, k \neq 0}^{\lceil \frac{n+1}{2} \rceil} \lambda_k^{(\omega; -\delta, \delta)} K_n^* \left(-\pi, \pi; \psi_s^{(n)}, t_k^{(\omega; -\delta, \delta)} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.38)$$

(siehe (2.21)). Bei gegebenem Polynomgrad n ist die Knoten- und Gewichtsanzahl $z(n) := 4(n+1)(n+2)$. Für einige Polynomgrade geben wir sie hier an:

n	1	2	4	6	8	10	12	14	20	30
$z(n)$	24	48	120	224	360	528	728	960	1848	3968

2.3.1 Bestimmung der Quadraturformeln über Kreisbögen

Bei der Konstruktion der Quadratur bestimmen wir einige Quadraturformeln über Kreisbögen bezüglich verschiedener Gewichtsfunktionen, im Einzelnen sind das

- die Quadraturformel aus (2.18) mit den Gewichten $\lambda_r^{(\omega;0,\mu)}$ und Knoten $t_r^{(\omega;0,\mu)} + \frac{\mu}{2}$, $r = -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\omega(0, \mu; x) := \begin{cases} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos(\frac{\mu}{2}), 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

- die Quadraturformel aus (2.19) mit den Gewichten $\lambda_s^{(\omega;-\pi,\pi)}$ und Knoten $t_s^{(\omega;-\pi,\pi)}$, $s = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\omega(-\pi, \pi; x) := \begin{cases} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (-1, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

- die Quadraturformel aus (2.23) mit den Gewichten $\lambda_k^{(W_0;-\delta,\delta)}$ und Knoten $t_k^{(W_0;-\delta,\delta)}$, $k = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$W_0(\delta; x) := \begin{cases} (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + x^2)^{-\lfloor (n+1)/2 \rfloor} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

- die Quadraturformel aus (2.24) mit den Gewichten $\lambda_k^{(W_1;-\delta,\delta)}$ und Knoten $t_k^{(W_1;-\delta,\delta)}$, $k = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$W_1(\delta; x) := \begin{cases} (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + x^2)^{-\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1/2} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

- die Quadraturformel aus (2.25) mit den Gewichten $\lambda_k^{(W_2;-\delta,\delta)}$ und Knoten $t_k^{(W_2;-\delta,\delta)}$, $k = -\lceil (n+1)/2 \rceil, \dots, -1, 1, \dots, -\lceil (n+1)/2 \rceil$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$W_2(\delta; x) := \begin{cases} \arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}/x) (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

- die Quadraturformel aus (2.26) mit den Gewichten $\lambda_k^{(\omega;-\delta,\delta)}$ und Knoten $t_k^{(\omega;-\delta,\delta)}$, $k = -\lceil (n+1)/2 \rceil, \dots, -1, 1, \dots, -\lceil (n+1)/2 \rceil$, bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\omega(-\delta, \delta; x) := \begin{cases} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (\cos \delta, 1), \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Mit der Quadraturformel aus (2.19) liegt ein besonders einfacher Fall vor. Die Knoten $t_j^{(\omega; -\pi, \pi)}$ sind gleich $\arccos x_j^{(\omega; -\pi, \pi)}$, wobei $x_j^{(\omega; -\pi, \pi)}$ die Nullstellen des Polynoms $p_{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil}^{(\omega, -1, 1)}$ sind. Die Polynome $\{p_k^{(\omega; -1, 1)}\}_{k=0}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil}$ sind orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion $\omega(-\pi, \pi; x)$, d. h. es sind normalisierte Chebychev-Polynome erster Art. Für alle Polynome $q \in \Pi_{2n}$ gilt nach Satz 1.6 die Quadraturformel

$$\int_{-1}^1 q(x)(1-x^2)^{-1/2} dx = \sum_{j=1}^{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(\omega; -\pi, \pi)} q(x_j^{(\omega; -\pi, \pi)}).$$

Hier liegen die Chebyshev-Gewichte $\lambda_j^{(\omega; -\pi, \pi)} = \frac{\pi}{\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil}$ und Chebyshev-Knoten $x_j^{(\omega; -\pi, \pi)} = \cos\left(\frac{(2j-1)\pi}{2\lceil \frac{2n+1}{2} \rceil}\right)$ vor (siehe z. B. [35, S. 1133]).

Wie man erkennen kann, sind die Knoten der übrigen Quadraturformeln alle von der Bauart

$$t_j^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a+b}{2} = \arccos x_j^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a+b}{2}, \quad j = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil,$$

wobei mit $\hat{\omega}(\circ) = \omega_1(\circ)(1-\circ^2)^{-1/2}$ eine nichtnegative Gewichtsfunktion mit der glatten Funktion ω_1 auf dem Intervall $(\cos \kappa, 1)$, $\kappa = \frac{b-a}{2}$ mit $0 < \kappa < \pi$, auf eben diesem Intervall gegeben sei. Die Werte $x_j^{(\hat{\omega}; a, b)}$, $j = 1, \dots, \lceil \frac{m+1}{2} \rceil$, sind die Nullstellen des Polynoms $p_{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}^{(\hat{\omega}; \cos \kappa, 1)}$. Die Polynome $\{p_k^{(\hat{\omega}; \cos \kappa, 1)}\}_{k=0}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil}$ sind orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion $\hat{\omega}$. Mit den Gewichten

$$\lambda_j^{(\hat{\omega}; a, b)} = \int_{\cos \kappa}^1 \ell_j^2(x) \omega_1(x) (1-x^2)^{-1/2} dx$$

gilt für alle Polynome $q \in \Pi_m$ die Gleichheit

$$\int_{\cos \kappa}^1 q(x) \omega_1(x) (1-x^2)^{-1/2} dx = \sum_{j=1}^{\lceil \frac{m+1}{2} \rceil} \lambda_j^{(\hat{\omega}; a, b)} q(x_j^{(\hat{\omega}; a, b)})$$

nach Satz 1.6. Effektiv lassen sich die Gauß-Gewichte $\lambda_j^{(\hat{\omega}; a, b)}$ und -Knoten $x_j^{(\hat{\omega}; a, b)}$ über die Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten bestimmen. Diese liefert beispielsweise der Stieltjes-Algorithmus, falls die Momente

$$\mu_r^{(\hat{\omega}; \cos \kappa, 1)} = \int_{\cos \kappa}^1 x^r \omega_1(x) (1-x^2)^{-1/2} dx, \quad r = 0, 1, \dots, m,$$

bekannt sind. In einem ersten Ansatz haben wir mit dem Computeralgebra-System Mathematica diese Integrale bis zum Polynomgrad $n = 5$ als symbolische Ausdrücke dargestellt und Beispiele berechnet. Dieses Verfahren ist aber sehr instabil.

Daher gehen wir einen anderen Weg und diskretisieren die Momente, wie es Gautschi in [11, S. 293–298], [12, S. 90–98] beschreibt. Im Kapitel 1.3.2 haben wir in allgemeiner

Form die einzelnen Schritte dargestellt.

Wir führen die Substitution $x = \phi_{\cos \kappa}(t)$ mit der linearen Funktion $\phi_{\cos \kappa}$ aus (1.5) durch (siehe (1.6)), approximieren das Integral mit der Gauß-Jacobi-Quadraturformel bezüglich der Gewichtsfunktion $(1 - t)^{-1/2}$ auf dem Intervall $(-1, 1)$ und erhalten

$$\begin{aligned} & \int_{\cos \kappa}^1 x^r \omega_1(x) (1 - x^2)^{-1/2} dx \\ &= \sqrt{\frac{1 - \cos \kappa}{2}} \int_{-1}^1 \phi_{\cos \kappa}^r(t) \omega_1(\phi_{\cos \kappa}(t)) (1 + \phi_{\cos \kappa}(t))^{-1/2} (1 - t)^{-1/2} dt \\ &\approx \sqrt{\frac{1 - \cos \kappa}{2}} \sum_{k=1}^{N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)} w_k^{(-1/2)} \phi_{\cos \kappa}^r(x_k^{(-1/2)}) \\ &\quad \times \omega_1(\phi_{\cos \kappa}(x_k^{(-1/2)})) (1 + \phi_{\cos \kappa}(x_k^{(-1/2)}))^{-1/2} \end{aligned}$$

mit den Gewichten $w_k^{(-1/2)}$ und den Knoten $x_k^{(-1/2)}$, $k = 1, 2, \dots, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$, aus (1.7). Der Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16) berechnet auf Grundlage dieser diskretisierten Momente die Dreiterm-Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}$ und $\hat{\beta}_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}$. Über die Wahl von ϵ können wir die Größe des Diskretisierungsparameters $N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$ und damit den Approximationsfehler unseres Verfahrens beeinflussen. Wir nehmen an dieser Stelle nämlich in unserer Berechnung die Quadraturfehler

$$\begin{aligned} & \tilde{E}_{N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon), -1/2}(f_{\cos \kappa, -1/2, r}) \\ &= \frac{2^{2N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon) + 1/2} \Gamma^2(N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon) + 1/2) (N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)!)^2}{\Gamma(2N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon) + 1/2) \Gamma(2N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon) + 3/2) (2N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)!)^2} \\ &\quad \times f_{\cos \kappa, -1/2, r}^{(2N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon))}(\eta), \quad \eta \in (-1, 1), \end{aligned} \tag{2.39}$$

mit den Funktionen

$$f_{\cos \kappa, -1/2, r}(t) := \phi_{\cos \kappa}^r(t) \omega_1(\phi_{\cos \kappa}(t)) (1 + \phi_{\cos \kappa}(t))^{-1/2}, \quad r = 0, 1, \dots, m,$$

in Kauf (siehe (1.14)), dabei ist, hier noch einmal zur Erinnerung,

$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$	m	$\omega_1(\circ) = \hat{\omega}(\circ) (1 - \circ^2)^{1/2}$	κ
ω	0	μ	$N(\omega; 0, \mu, \epsilon)$	$2n + 3$	1	$\mu/2$
W_0	$-\delta$	δ	$N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$	$(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}$	δ
W_1	$-\delta$	δ	$N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$	$(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+2}{2} \rfloor + \frac{1}{2}}$	δ
W_2	$-\delta$	δ	$N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon)$	n	$\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 / \circ)$	δ
ω	$-\delta$	δ	$N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon)$	n	1	δ

Mit den Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}$ und $\hat{\beta}_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}$ stellen wir die Jacobi-Matrix aus (1.4) auf und bestimmen mit den Sätzen 1.11 und 1.12 Gauß-Jacobi-Gewichte und -Knoten $\lambda_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)}$ und $x_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)}$ als Näherungen der gesuchten Gewichte $\lambda_j^{(\hat{\omega}; a, b)}$ und Knoten $x_j^{(\hat{\omega}; a, b)}$.

2.3.2 Auswerten von Polynomen

Zur Berechnung der Gewichte aus (2.38) müssen wir u. a. die trigonometrischen Polynome $Q_0(\circ, \circ)$ aus (2.27), $Q_1(\circ, \circ)$ aus (2.28), damit verbunden die Kerne $K_{n+1}^*(0, \mu; \circ, \circ)$ aus (2.12), und $K_n^*(-\pi, \pi; \circ, \circ)$ aus (2.13) auswerten. Damit beschäftigen wir uns in diesem Abschnitt.

Wir erinnern an die Darstellung der Kernfunktion $K_{n+1}^*(0, \mu; \circ, \circ)$ aus (2.12),

$$\begin{aligned} K_{n+1}^*(0, \mu; \phi, \vartheta) &= \frac{1}{2} \left(\sum_{j=0}^{n+1} p_j^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) p_j^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\vartheta - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right. \\ &\quad + \sin \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \sin \left(\vartheta - \frac{\mu}{2} \right) \\ &\quad \left. \times \sum_{j=1}^n p_j^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) p_j^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\vartheta - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right). \end{aligned}$$

Dabei sind die Polynome $\{p_j^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)}\}_{j=0}^{n+1}$ orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\omega(0, \mu; x) = \begin{cases} (1 - x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in \left(\cos \left(\frac{\mu}{2} \right), 1 \right), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

und die Polynome $\{p_j^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)}\}_{j=0}^n$ sind orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion $\tilde{\omega}(0, \mu; x) = (1 - x^2)\omega(0, \mu; x)$. Diese Polynome sollen nun an verschiedenen Knoten ausgewertet werden. Dies soll rekursiv geschehen, die entsprechenden Dreiterm-Rekursionskoeffizienten

$$\hat{\alpha}_{j, N_1^{(\omega; 0, \mu, \epsilon)}}^{(\omega; 0, \mu, \epsilon)}, \quad \hat{\beta}_{j, N_1^{(\omega; 0, \mu, \epsilon)}}^{(\omega; 0, \mu, \epsilon)}, \quad j = 1, 2, \dots, n+1, \quad (2.40)$$

bzw.

$$\hat{\alpha}_{j, N_2^{(\tilde{\omega}; 0, \mu, \epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; 0, \mu, \epsilon)}, \quad \hat{\beta}_{j, N_2^{(\tilde{\omega}; 0, \mu, \epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; 0, \mu, \epsilon)}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (2.41)$$

berechnen wir mit dem Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16). Sie sind mit einem Verfahrensfehler behaftet, dadurch dass die Momente

$$\begin{aligned} &\int_{\cos(\mu/2)}^1 x^r (1 - x^2)^{-1/2} dx \\ &= \sqrt{\frac{1 - \cos(\frac{\mu}{2})}{2}} \int_{-1}^1 \phi_{\cos(\mu/2)}^r(t) (1 + \phi_{\cos(\mu/2)}(t))^{-1/2} (1 - t)^{-1/2} dt, \\ r &= 0, 1, \dots, 2n+1, \end{aligned}$$

bzw.

$$\int_{\cos(\mu/2)}^1 x^r (1 - x^2)^{1/2} dx$$

$$= \left(\frac{1 - \cos\left(\frac{\mu}{2}\right)}{2} \right)^{3/2} \int_{-1}^1 \phi_{\cos(\mu/2)}^r(t) (1 + \phi_{\cos(\mu/2)}(t))^{1/2} (1-t)^{1/2} dt,$$

$$r = 0, 1, \dots, 2n-1,$$

mit der linearen Funktion $\phi_{\cos(\mu/2)}$ aus (1.5), durch eine Gauß-Quadratur mit den Gewichten $w_k^{(-1/2)}$ und Knoten $x_k^{(-1/2)}$, $k = 1, 2, \dots, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}$, bzw. den Gewichten $w_k^{(1/2)}$ und Knoten $x_k^{(1/2)}$, $k = 1, 2, \dots, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}$, aus (1.7) approximiert werden (siehe (1.6)). Nach (1.14) und (2.39) sind es die Fehler

$$\tilde{E}_{N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}, -1/2}(f_{\cos(\mu/2), -1/2, r}), \quad r = 0, 1, \dots, 2n+1, \quad (2.42)$$

mit den Funktionen

$$f_{\cos(\mu/2), -1/2, r}(t) := (\phi_{\cos(\mu/2)}(t))^r (1 + \phi_{\cos(\mu/2)}(t))^{-1/2}$$

bzw.

$$\tilde{E}_{N^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}, 1/2}(f_{\cos(\mu/2), 1/2, r}), \quad r = 0, 1, \dots, 2n-1, \quad (2.43)$$

mit den Funktionen

$$f_{\cos(\mu/2), 1/2, r}(t) := (\phi_{\cos(\mu/2)}(t))^r (1 + \phi_{\cos(\mu/2)}(t))^{1/2}.$$

Mit dem Stieltjes-Algorithmus aus Satz 1.10 gilt

$$\begin{aligned} & \hat{\beta}_{j+1, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)} p_{j, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) \\ &= \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) - \hat{\alpha}_{j, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)} \right) p_{j-1, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) \\ & \quad - \hat{\beta}_{j, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)} p_{j-2, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.44)$$

$$j = 1, 2, \dots, n+1,$$

gestartet mit den Polynomen $p_{-1, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} = 0$ und $p_{0, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} = 1/\hat{\beta}_{1, N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}$, und

$$\begin{aligned} & \hat{\beta}_{j+1, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)} p_{j, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) \\ &= \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) - \hat{\alpha}_{j, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)} \right) p_{j-1, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right) \\ & \quad - \hat{\beta}_{j, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)} p_{j-2, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\phi - \frac{\mu}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (2.45)$$

$$j = 1, 2, \dots, n,$$

gestartet mit den Polynomen $p_{-1, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} = 0$ und $p_{0, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} = 1/\hat{\beta}_{1, N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}$. Aus (2.12) ist uns die Kernfunktion

$$\begin{aligned} K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho) &= \frac{1}{2} \left(\sum_{j=0}^n p_j^{(\omega; -1, 1)}(\cos \psi) p_j^{(\omega; -1, 1)}(\cos \varrho) \right. \\ & \quad \left. + \sin \psi \sin \varrho \sum_{j=1}^{n-1} p_j^{(\tilde{\omega}; -1, 1)}(\cos \psi) p_j^{(\tilde{\omega}; -1, 1)}(\cos \varrho) \right) \end{aligned}$$

bekannt. Die Polynome $\{p_j^{(\omega;-1,1)}\}_{j=0}^n$ sind orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion

$$\omega(-\pi, \pi; x) := \begin{cases} (1-x^2)^{-1/2}, & \text{falls } x \in (-1, 1), \\ 0, & \text{sonst,} \end{cases}$$

und die Polynome $\{p_j^{(\tilde{\omega};-1,1)}\}_{j=0}^{n-1}$ orthonormal bezüglich der Gewichtsfunktion $\tilde{\omega}(-\pi, \pi; x) = (1-x^2)\omega(-\pi, \pi; x)$. Wir wollen die Kernfunktion an beliebigen Knoten auswerten, daher müssen wir die Werte der Polynome $p_j^{(\omega;-1,1)}(\cos \circ)$, $j = 0, 1, \dots, n$, und $p_j^{(\tilde{\omega};-1,1)}(\cos \circ)$, $j = 0, 1, \dots, n-1$, an diesen Knoten bestimmen. Die bezüglich der Gewichtsfunktion $\omega(-\pi, \pi; \circ)$ orthogonalen Polynome sind Chebyshev-Polynome erster Art $T_j(\cos \circ) = \cos(j\circ)$. Die Chebyshev-Polynome zweiter Art $U_j(\cos \circ) = \sin((j+1)\circ)/\sin(\circ)$ sind orthogonal bezüglich der Gewichtsfunktion $\tilde{\omega}(-\pi, \pi; \circ)$. Für die normalisierten Polynome gilt

$$p_j^{(\omega;-1,1)}(\cos \circ) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} T_j(\cos \circ), & \text{falls } j = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} T_j(\cos \circ), & \text{falls } j > 0, \end{cases}$$

und

$$p_j^{(\tilde{\omega};-1,1)}(\cos \circ) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} U_j(\cos \circ).$$

Also ist (siehe [5, S. 294])

$$\begin{aligned} & K_n^*(-\pi, \pi; \psi, \varrho) \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\pi} + \frac{2}{\pi} \sum_{j=1}^n \cos(j\psi) \cos(j\varrho) + \sin \psi \sin \varrho \frac{2}{\pi} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\sin((j+1)\psi)}{\sin \psi} \frac{\sin((j+1)\varrho)}{\sin \varrho} \right) \\ &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^n \cos(j\psi) \cos(j\varrho) + \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^n \sin(j\psi) \sin(j\varrho) \\ &= \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \sum_{j=1}^n \cos(j(\psi - \varrho)) \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\sin\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)(\psi - \varrho)\right)}{2 \sin\left(\frac{1}{2}(\psi - \varrho)\right)}. \end{aligned}$$

2.3.3 Mathematica und Präzision

Wir verwenden für unsere Berechnungen die mathematische Software Mathematica, da wir die Möglichkeit der symbolischen Berechnung und der Berechnung mit reellen Zahlen beliebiger Präzision, d. h. mit beliebig langer Mantisse, nutzen wollen (siehe [22]).

Mathematica ist so eingerichtet, dass, falls eine reelle Zahl x eine gewisse Unsicherheit $\tilde{\delta}$ in ihrem Wert hat, ihr wahrer Wert irgendwo im Intervall $[x - \tilde{\delta}/2, x + \tilde{\delta}/2]$ liegt. Hat ihr Wert Präzision p , dann liegt die Unsicherheit bei $\tilde{\delta} = |x|10^{-p}$. Ihre Präzision p

ist folglich als $p = -\log_{10} \frac{\bar{\delta}}{|x|}$ definiert. Die Präzision ist also ein Maß für den relativen Fehler einer Zahl. Mathematica gibt uns die Möglichkeit, reelle Zahlen mit verschiedenen großen Präzisionen zu generieren und die Präzision einer Zahl zu bestimmen. Die Präzision einer Matrix ist dabei gleich dem kleinsten Präzisionswert unter den Matrixeinträgen. Die Präzision von Null ist unendlich, wie auch die Präzision einer symbolischen Zahl. Im Allgemeinen wird angenommen, dass die Zahl x mit beliebiger Präzision p Ziffern hat, die genau bekannt sind, gefolgt von Ziffern, die unbekannt sind. Wird eine Berechnung ausgeführt, dann verfolgt Mathematica, welche Ziffern des Ergebnisses von den unbekanntem Ziffern der Eingabe beeinflusst sein könnten. Es legt die Präzision des Ergebnisses so fest, dass die betroffenen Ziffern nicht verwendet werden. So wird sichergestellt, dass die Ziffern des Ergebnisses korrekt sind. Bei vielen Berechnungen wird die Präzision der erhaltenen Ergebnisse durch Rundungsfehler zunehmend geringer. Verlust an Präzision bedeutet Verlust an Information über das Ergebnis. Der Verlust an Präzision an einer Stelle der Berechnung kann im Grunde nicht wiedergewonnen werden. Die Präzision hilft uns bei der Analyse der Stabilität von Algorithmen.

2.3.4 Vorberechnungen

Wir starten im Laufe der Berechnung insgesamt siebenmal den Gautschi-Algorithmus und benötigen sechsmal dabei im Diskretisierungsschritt Gewichte $w_k^{(-1/2)}$ und Knoten $x_k^{(-1/2)}$ und einmal die Gewichte $w_k^{(1/2)}$ und Knoten $x_k^{(1/2)}$, $k = 1, 2, \dots, N$, aus (1.7) für verschiedene N . Diese Quadraturformeln können über Dreiterm-Koeffizienten aus Lemma 1.13, die symbolisch bestimmt und dann in Zahlen beliebiger Präzision $p > 16$ umgewandelt werden, anschließend über die Eigenwerte und Eigenvektoren der Jacobi-Matrix berechnet werden. Die Berechnungszeit wächst schnell mit N , die Berechnung der Eigenwerte und Eigenvektoren mit der Mathematica-Funktion Eigensystem ist dabei der weitaus teuerste Schritt. Die Berechnungszeit verringert sich, etwa um Faktor 10, wenn die Knoten $x_k^{(-1/2)}$ bzw. $x_k^{(1/2)}$, die ja die Nullstellen der orthogonalen Polynome $P_N^{(\rho,0)}$, $\rho = -1/2$ bzw. $\rho = 1/2$, aus (1.8) sind, mit den Mathematica-Funktionen Solve und N als Zahlen mit vorgegebener Präzision $p > 16$ bestimmt werden. Mit der Dreiterm-Rekursion aus Satz 1.10 können dann Jacobi-Polynome $p_j^{(\rho,0)}$, $j = 0, 1, \dots, N-1$, aus (1.9) an den Knoten $x_k^{(\rho)}$, $\rho = -1/2, 1/2$, ausgewertet und mit (1.10) die Gewichte $w_k^{(\rho)}$, $k = 1, 2, \dots, N$, ermittelt werden. Die Dreiterm-Rekursion bringt aber Präzisionsverluste mit sich. Die Präzision der Gewichte nimmt linear mit zunehmendem N ab. Wird dieser Verlust berücksichtigt, indem die Präzision der Nullstellen $x_k^{(\rho)}$ und die der Dreiterm-Koeffizienten aus Lemma 1.13 dementsprechend erhöht wird, so kann der Präzisionsverlust ausgeglichen werden, ohne dass die dadurch bedingte zusätzliche Berechnungszeit zu sehr ins Gewicht fällt.

Da wir einige Male die Nullstellen $x_k^{(\rho)}$, $\rho = -1/2, 1/2$, $k = 1, 2, \dots, N$, benötigen, ist es sinnvoll, sie für $N = 1, 2, \dots, N_{\max}$ vorzuberechnen und abzuspeichern.

2.3.5 Gesamtdarstellung der Berechnungsschritte

Eingabedaten sind neben den Winkeln μ , α und β des sphärischen Dreiecks $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ aus (2.16) der Polynomgrad n . Falls uns beispielsweise die Winkel als Gleitpunktzahlen mit doppelter Genauigkeit aus 64 Bits vorliegen, das ergibt in der Regel 16 Dezimalstellen in der Mantisse, dann können wir sie mit dem Mathematica-Befehl Rationalize mit Genauigkeit 10^{-16} in rationale Zahlen umwandeln. Einige wenige Rechenoperationen können relativ schnell symbolisch erfolgen, die Ergebnisse werden schließlich in Zahlen beliebiger Genauigkeit p umgewandelt. Unser Berechnungsziel sind dann Gewichte und Knoten mit Präzision ≥ 16 und 16 korrekten Dezimalstellen in der Mantisse. Für die Präzision p wählen wir einen genügend großen Wert $p > 16$. Für den Gautschi-Algorithmus geben wir einen genügend kleinen Vergleichswert ϵ , $10^{-16} \geq \epsilon \geq 10^{-p}$, für das Abbruchkriterium an.

Wir berechnen die Gewichte und Knoten in folgenden Schritten:

1. Berechnung der Quadraturformeln

Wir bestimmen den von den Winkeln und dem Radius abhängigen Wert $T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)} = \tan \mu \cos((\beta - \alpha)/2)$ aus (2.15). Mit Hilfe des Gautschi-Algorithmus berechnen wir die Gewichte und Knoten

$$\lambda_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)}, \quad t_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a + b}{2}, \quad j = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \quad (2.46)$$

mit

$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$	m	$\omega_1(\circ) = \hat{\omega}(\circ)(1 - \circ^2)^{1/2}$
ω	0	μ	$N(\omega; 0, \mu, \epsilon)$	$2n + 3$	1
W_0	$-\delta$	δ	$N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$	$(\tan^2 \mu \cos^2 \delta + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}$
W_1	$-\delta$	δ	$N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$	$(\tan^2 \mu \cos^2 \delta + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+2}{2} \rfloor + \frac{1}{2}}$
W_2	$-\delta$	δ	$N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon)$	n	$\arctan(\tan \mu \cos \delta / \circ)$
ω	$-\delta$	δ	$N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon)$	n	1

Diese Gewichte und Knoten approximieren die entsprechenden Gewichte und Knoten

$$\lambda_j^{(\hat{\omega}; a, b)}, \quad t_j^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a + b}{2}, \quad j = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil,$$

der Quadraturformeln aus (2.18) und (2.23) bis (2.26). Den Quadraturfehlern liegen die Quadraturfehler aus (2.39) zugrunde. Wir bestimmen symbolisch die Quadraturformel aus (2.19) und wandeln die Gewichte $\lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)}$ und Knoten $\psi_s^{(n)} = t_s^{(\omega; -\pi, \pi)}$ in Dezimalzahlen der Präzision p um.

2. Auswerten der Kerne bzw. der Polynome und Aufstellen der Matrizen

Die Dreiterm-Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}$ und $\hat{\beta}_{j,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}$ aus (2.40) sowie die Dreiterm-Koeffizienten $\hat{\alpha}_{j,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}$ und $\hat{\beta}_{j,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}$ aus (2.41) werden berechnet. Der Verfahrensfehler der Koeffizienten liegt in den Quadraturfehlern aus (2.42) bzw. aus (2.43) begründet. Rekursiv, wie in (2.44) und (2.45) beschrieben, berechnen wir die Einträge der Matrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\omega;\cos(\mu/2),1,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} &:= \left(p_{j,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;\cos(\mu/2),1)} \left(\cos \left(\chi_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(n,\mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right) \\ &= \left(p_{j,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;\cos(\mu/2),1)} (\cos t_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu)}) \right), \\ j &= 0, 1, \dots, n+1, \quad l = -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\omega;\cos(\mu/2),1,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} &:= \left(p_{j,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;\cos(\mu/2),1)} \left(\cos \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right), \\ j &= 0, 1, \dots, n+1, \quad k = 0, 1, \dots, 2n+2, \end{aligned} \quad (2.47)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)})} &:= \left(p_{j,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1)} \left(\cos \left(\chi_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(n,\mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right) \\ &= \left(p_{j,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1)} (\cos t_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu)}) \right), \\ j &= 0, 1, \dots, n, \quad l = -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)})} &:= \left(p_{j,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)}}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1)} \left(\cos \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right), \\ j &= 0, 1, \dots, n, \quad k = 0, 1, \dots, 2n+2. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Außerdem bestimmen wir die Diagonalmatrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} &:= \text{diag} \left(\sin \left(\chi_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(n,\mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \right) = \text{diag} \left(\sin t_{l,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)}}^{(\omega;0,\mu)} \right), \\ l &= -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ \mathbf{D} &:= \text{diag} \left(\sin \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right), \quad k = 0, 1, \dots, 2n+2. \end{aligned}$$

Die Einträge des Matrizenproduktes

$$\begin{aligned} \mathbf{K} &:= \frac{1}{2} \left(\left(\mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\omega;\cos(\mu/2),1,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} \right)^\top \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\omega;\cos(\mu/2),1,N_1^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} \right. \\ &\quad \left. + \mathbf{D}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})} \left(\mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)})} \right)^\top \mathbf{P}_{(\omega;0,\mu,N^{(\omega;0,\mu,\epsilon)})}^{(\tilde{\omega};\cos(\mu/2),1,N_2^{(\tilde{\omega};0,\mu,\epsilon)})} \mathbf{D} \right) \end{aligned} \quad (2.49)$$

sind damit Näherungen der Werte des Kerns

$$K_{n+1}^* \left(0, \mu; \chi_l^{(n,\mu)}, \frac{2\pi k}{2n+3} \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left(\sum_{j=0}^{n+1} p_j^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\chi_l^{(n, \mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \right) p_j^{(\omega; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right. \\
&\quad \left. + \sin \left(\chi_l^{(n, \mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \sin \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. \times \sum_{j=1}^n p_j^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\chi_l^{(n, \mu)} - \frac{\mu}{2} \right) \right) p_j^{(\tilde{\omega}; \cos(\mu/2), 1)} \left(\cos \left(\frac{2\pi k}{2n+3} - \frac{\mu}{2} \right) \right) \right), \\
l &= -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \quad k = 0, \dots, 2n+2.
\end{aligned}$$

Symbolisch werden die Einträge der Matrizen

$$\mathbf{E}_1 := \left(e^{-i2\pi 2mk/(2n+3)} \right), \quad (2.50)$$

$$k = 0, 1, \dots, 2n+2, \quad m = -\left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor, \dots, -1, 1, \dots, \left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor,$$

$$\mathbf{E}_2 := \left(e^{-i2\pi(2m-1)k/(2n+3)} \right), \quad (2.51)$$

$$k = 0, 1, \dots, 2n+2, \quad m = -\left\lfloor \frac{n+2}{2} \right\rfloor + 1, \dots, \left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor,$$

$$(\mathbf{R})_{m,k} := \left(-\frac{i}{(2m-1)} \right)_{m,k}, \quad (2.52)$$

$$m = -\left\lfloor \frac{n+2}{2} \right\rfloor + 1, \dots, \left\lfloor \frac{n+2}{2} \right\rfloor,$$

$$k = -\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil,$$

und

$$(\mathbf{E}_3)_{k,l} := 1, \quad k = 1, \dots, 2n+3, \quad l = 1, \dots, 2\left\lceil \frac{n+1}{2} \right\rceil, \quad (2.53)$$

berechnet. Desweiteren werden die Matrizen

$$\begin{aligned}
&\mathbf{R}_{(W_0; -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \\
&:= \left(-\frac{i}{2m} \left(\frac{(\cos t_{k, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)}^{(W_0; -\delta, \delta)} + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2m}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 t_{k, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)}^{(W_0; -\delta, \delta)})^{m - \lfloor (n+1)/2 \rfloor}} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - (T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 - \cos^2 t_{k, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)}^{(W_0; -\delta, \delta)})^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} \right) \right),
\end{aligned}$$

$$m = -\left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor, \dots, -1, 1, \dots, \left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor,$$

$$k = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1,$$

und

$$\mathbf{R}_{(W_1; -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))}$$

$$:= \left(-\frac{i}{(2m-1)} \frac{(\cos t_{k, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon)}^{(W_1; -\delta, \delta)} + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)})^{2m-1}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}^2 + \cos^2 t_{k, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon)}^{(W_1; -\delta, \delta)})^{m - \lfloor (n+2)/2 \rfloor}} \right),$$

$$m = -\left\lfloor \frac{n+2}{2} \right\rfloor + 1, \dots, \left\lfloor \frac{n+2}{2} \right\rfloor, \quad k = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1,$$

aufgestellt. Die Einträge der Matrix

$$\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_1 \mathbf{R}_{(W_0; -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))}$$

sind näherungsweise die Werte des Polynoms Q_0 aus (2.27) an den Stellen $(\chi_l^{(n, \mu)}, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)})$, d. h. die Werte

$$\begin{aligned} & Q_0(\chi_l^{(n, \mu)}, t_k^{(W_0; -\delta, \delta)}) \\ &= - \sum_{j=-\lfloor (n+1)/2 \rfloor, j \neq 0}^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} c_{2j}(\chi_l^{(n, \mu)}) \frac{i}{2j} \left(\frac{(\cos t_k^{(W_0; -\delta, \delta)} + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)})^{2j}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)}^2 + \cos^2 t_k^{(W_0; -\delta, \delta)})^{j-\lfloor (n+1)/2 \rfloor}} \right. \\ & \quad \left. - (T_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)}^2 + \cos^2 t_k^{(W_0; -\delta, \delta)})^{\lfloor (n+1)/2 \rfloor} \right) \\ & l = -\left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil, \\ & k = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \end{aligned}$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$c_{2j}(\chi_l^{(n, \mu)}) := \frac{1}{2n+3} \sum_{r=0}^{2n+2} K_{n+1}^* \left(0, \mu; \chi_l^{(n, \mu)}, \frac{2\pi r}{2n+3} \right) e^{-i2j2\pi r/(2n+3)}$$

aus (2.29), wie man leicht verifizieren kann. Die entsprechenden Quadraturfehler aus (2.39), (2.42) und (2.43) bedingen eine nur approximativ mögliche Berechnung. Die Einträge der Matrix

$$\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_2 \mathbf{R}_{(W_1; -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))}$$

approximieren analog dazu die Werte

$$\begin{aligned} Q_1(\chi_l^{(n, \mu)}, t_k^{(W_1; -\delta, \delta)}) &:= - \sum_{j=-\lfloor (n+2)/2 \rfloor+1}^{\lfloor (n+2)/2 \rfloor} c_{2j-1}(\chi_l^{(n, \mu)}) \frac{i}{(2j-1)} \\ & \quad \times \frac{(\cos t_k^{(W_1; -\delta, \delta)} + iT_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)})^{2j-1}}{(T_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)}^2 + \cos^2 t_k^{(W_1; -\delta, \delta)})^{j-\lfloor (n+2)/2 \rfloor}} \end{aligned}$$

mit den Fourier-Koeffizienten

$$c_{2j-1}(\chi_l^{(n, \mu)}) := \frac{1}{2n+3} \sum_{r=0}^{2n+2} K_{n+1}^* \left(0, \mu; \chi_l^{(n, \mu)}, \frac{2\pi r}{2n+3} \right) e^{-i(2j-1)2\pi r/(2n+3)}$$

(siehe (2.28) und (2.29)).

Es ist leicht überprüfbar, dass die Spalten der Matrix

$$\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_2 \mathbf{R}$$

von den Werten

$$C(\chi_l^{(n,\mu)}) = - \sum_{j=-\lfloor (n+2)/2 \rfloor + 1}^{\lfloor (n+2)/2 \rfloor} c_{2j-1}(\chi_l^{(n,\mu)}) \frac{i}{(2j-1)}$$

$$l = -\left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{2n+3}{2} \right\rceil,$$

aus (2.30) gebildet werden. Die Werte

$$c_0(\chi_l^{(n,\mu)}) = \frac{1}{2n+3} \sum_{k=0}^{2n+2} K_{n+1}^* \left(0, \mu; \chi_l^{(n,\mu)}, \frac{2\pi k}{2n+3} \right), \quad l = -(n+1), \dots, n+1,$$

aus (2.29) werden durch die Einträge der Spalten der Matrix

$$\frac{1}{2n+3} \mathbf{KE}_3$$

approximiert. Auch hier liegt der Fehler in den Quadraturfehlern aus (2.39), (2.42) und (2.43) begründet.

Die Matrizen

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\omega; -1, 1)} \right)_{j,l} &:= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos(j\psi_l^{(n)}), & \text{falls } j = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos(j\psi_l^{(n)}), & \text{falls } j > 0, \end{cases} \\ j &= 0, 1, \dots, n, \\ l &= -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \\ \left(\mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)_{j,l} &:= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin((j+1)\psi_l^{(n)}), \\ j &= 0, 1, \dots, n-1, \\ l &= -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \\ \left(\mathbf{P}_{(\omega; a, b, N(\tilde{\omega}; a, b, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} \right)_{j,l} &:= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos \left(j \left(t_{l, N(\tilde{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\tilde{\omega}, a, b)} + \frac{a+b}{2} + \frac{\alpha+\beta}{2} \right) \right), & \text{falls } j = 0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cos \left(j \left(t_{l, N(\tilde{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\tilde{\omega}, a, b)} + \frac{a+b}{2} + \frac{\alpha+\beta}{2} \right) \right), & \text{falls } j > 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.54)$$

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{P}_{(\tilde{\omega}; a, b, N(\tilde{\omega}; a, b, \epsilon))}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)_{j,l} &:= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left((j+1) \right. \\ &\quad \left. \times \left(t_{l, N(\tilde{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\tilde{\omega}, a, b)} + \frac{a+b}{2} + \frac{\alpha+\beta}{2} \right) \right), \\ j &= 0, 1, \dots, n-1, \\ l &= -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \end{aligned} \quad (2.55)$$

mit

$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$	m
W_0	$-\delta$	δ	$N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$
W_1	$-\delta$	δ	$N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon)$	$2n + 1$
W_2	$-\delta$	δ	$N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon)$	n
ω	$-\delta$	δ	$N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon)$	n

werden berechnet. So erhalten wir die Näherungen

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_{\hat{\omega}} &:= \left(\left(\mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\omega; -1, 1)} \right)^\top \mathbf{P}_{(\hat{\omega}; a, b, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} + \left(\mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\hat{\omega}; -1, 1)} \right)^\top \mathbf{P}_{(\hat{\omega}; a, b, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon))}^{(\hat{\omega}; -1, 1)} \right)_{l, k} \\
 &\approx 2K_n^* \left(-\pi, \pi; \psi_l^{(n)}, t_k^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a+b}{2} + \frac{\alpha+\beta}{2} \right), \\
 l &= -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \\
 k &= -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil.
 \end{aligned}$$

Es sind Näherungen, da die Knoten $t_{l, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a+b}{2}$ mit Fehlern behaftet sind, die wiederum auf den Quadraturfehlern aus (2.39) beruhen. Die Diagonalmatrizen

$$\hat{\mathbf{D}}_{(\hat{\omega}; a, b, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon))} := \text{diag} \left(\lambda_{k, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)} \right), \quad k = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil,$$

werden aufgestellt. Die Quadraturfehler aus (2.39) sind für die Fehler der Gewichte $\lambda_{k, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)}$ verantwortlich.

3. Berechnung des Integrals

Die Einträge der Matrix

$$\begin{aligned}
 \mathbf{K}_1 &:= \left(\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_1 \mathbf{R}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \right) \hat{\mathbf{D}}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \frac{1}{2} (\mathbf{K}_{W_0})^\top \\
 &+ \left(\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_2 \mathbf{R}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \right) \hat{\mathbf{D}}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \frac{1}{2} (\mathbf{K}_{W_1})^\top \\
 &+ \left(\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_3 \right) \hat{\mathbf{D}}_{(W_2, -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))} \frac{1}{2} (\mathbf{K}_{W_2})^\top \\
 &- \left(\frac{1}{2n+3} \mathbf{K} \mathbf{E}_2 \mathbf{R} \right) \hat{\mathbf{D}}_{(\omega, -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))} \frac{1}{2} (\mathbf{K}_\omega)^\top
 \end{aligned}$$

sind Approximationen der Integrale

$$\begin{aligned}
 &I_{\Delta(P'_1, P'_2, X_0)}(\chi_r^{(n, \mu)}, \psi_s^{(n)}) \\
 &:= \int_\alpha^\beta \int_0^{\arctan(T_{\Delta(P'_1, P'_2, x_0)} / \cos(\varrho - \frac{\alpha+\beta}{2}))} K_n^*(\mu; (\chi_r^{(n, \mu)}, \psi_s^{(n)}), (\vartheta, \varrho)) \, d\vartheta \, d\varrho,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} r &= -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ s &= -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \end{aligned}$$

aus (2.22). Ausklammern liefert die Ausdrücke

$$\mathbf{K}_2 := \frac{1}{4n+6} \mathbf{K} \tilde{\mathbf{P}} \quad (2.56)$$

mit

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{P}} &:= \mathbf{E}_1 \mathbf{R}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} (\mathbf{K}_{W_0})^\top \\ &\quad + \mathbf{E}_2 \mathbf{R}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} (\mathbf{K}_{W_1})^\top \\ &\quad + \mathbf{E}_3 \hat{\mathbf{D}}_{(W_2, -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))} (\mathbf{K}_{W_2})^\top \\ &\quad - \mathbf{E}_2 \mathbf{R} \hat{\mathbf{D}}_{(\omega, -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))} (\mathbf{K}_\omega)^\top \end{aligned} \quad (2.57)$$

und

$$\begin{aligned} \mathbf{K}_3 &:= \frac{1}{4n+6} \mathbf{K} \\ &\times \left(\left(\mathbf{E}_1 \mathbf{R}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_0; -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} \right)^\top \right. \right. \\ &\quad + \mathbf{E}_2 \mathbf{R}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_1; -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} \right)^\top \\ &\quad + \mathbf{E}_3 \hat{\mathbf{D}}_{(W_2, -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_2; -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} \right)^\top \\ &\quad \left. - \mathbf{E}_2 \mathbf{R} \hat{\mathbf{D}}_{(\omega, -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(\omega; -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\omega; -1, 1)} \right)^\top \right) \mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\omega; -1, 1)} \\ &\quad + \left(\mathbf{E}_1 \mathbf{R}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_0, -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_0; -\delta, \delta, N(W_0; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)^\top \right. \\ &\quad + \mathbf{E}_2 \mathbf{R}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \hat{\mathbf{D}}_{(W_1, -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_1; -\delta, \delta, N(W_1; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)^\top \\ &\quad + \mathbf{E}_3 \hat{\mathbf{D}}_{(W_2, -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(W_2; -\delta, \delta, N(W_2; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)^\top \\ &\quad \left. - \mathbf{E}_2 \mathbf{R} \hat{\mathbf{D}}_{(\omega, -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))} \left(\mathbf{P}_{(\omega; -\delta, \delta, N(\omega; -\delta, \delta, \epsilon))}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)} \right)^\top \right) \mathbf{P}_{(\omega; -\pi, \pi)}^{(\tilde{\omega}; -1, 1)}. \end{aligned}$$

4. Bestimmung der Gewichte

Mit den Diagonalmatrizen

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{D}}_{(\omega; 0, \mu, N(\omega; 0, \mu, \epsilon))} &:= \text{diag} \left(\lambda_{r, N(\omega; 0, \mu, \epsilon)}^{(\omega; 0, \mu)} \sin \chi_{r, N(\omega; 0, \mu, \epsilon)}^{(n, \mu)} \right), \\ r &= -(n+2), \dots, -1, 1, \dots, n+2, \\ \hat{\mathbf{D}}_{(\omega; -\pi, \pi)} &:= \text{diag} \left(\lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)} \right), \quad s = -(n+1), \dots, -1, 1, \dots, n+1, \end{aligned}$$

erhalten wir die Gewichte

$$\mathbf{w}^{(n, \mu, \alpha, \beta, \epsilon)} := \hat{\mathbf{D}}_{(\omega; 0, \mu, N(\omega; 0, \mu, \epsilon))} \mathbf{K}_2 \hat{\mathbf{D}}_{(\omega; -\pi, \pi)}. \quad (2.58)$$

Es sind Näherungen aufgrund der Quadraturfehler aus (2.39), (2.42) und (2.43) der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ aus (2.38).

5. Bestimmung der Knoten

Mit den polaren Winkeln $\chi_{r,N(\omega;0,\mu,\epsilon)}^{(n,\mu)}$ und den äquatorialen Winkeln $\psi_s^{(n)}$ erhalten wir die Knoten

$$\begin{aligned} (\mathbf{x}^{(n,\mu,\epsilon)})_{r,s} & \\ := & \left(\sin \chi_{r,N(\omega;0,\mu,\epsilon)}^{(n,\mu)} \cos \psi_s^{(n)}, \sin \chi_{r,N(\omega;0,\mu,\epsilon)}^{(n,\mu)} \sin \psi_s^{(n)}, \cos \chi_{r,N(\omega;0,\mu,\epsilon)}^{(n,\mu)} \right)^\top \end{aligned} \quad (2.59)$$

als Näherungen der Knoten aus (2.37). Wegen der entsprechenden Quadraturfehler aus (2.39) erhalten wir approximierte Werte.

2.4 Tests an gleichschenkligen sphärischen Dreiecken

Wir wollen unsere Quadraturformel für gleichschenklige Dreiecke $\Delta(P'_1, P'_2, X_0)$ aus (2.16), mit der Nordpol-Ecke $X_0 = (0, 0, 1)^\top$, untersuchen. Wir interessieren uns besonders für die Berechnungszeiten im Zusammenhang mit den Polynomgraden und den Winkeln der Ecken P'_1 und P'_2 .

Die Testrechnungen haben wir mit Mathematica 7 auf einem Rechner mit AMD Athlon(tm) 64 Prozessor 3000+, 2009.75 MHz Geschwindigkeit, mit 997.5 MB RAM und SUSE-Linux 11.2 (Kernel 2.6.27.7-9-pae i686) ausgeführt.

2.4.1 Testdaten

Für unsere Testdreiecke $\Delta(P'_{1,l}, P'_{2,l,k}, X_0)$ wählen wir die Ecken

$$\begin{aligned} P'_{1,l} &= (\sin \mu_l, 0, \cos \mu_l)^\top = (\mu_l, 0), \\ P'_{2,l,k} &= (\sin \mu_l \cos \beta_k, \sin \mu_l \sin \beta_k, \cos \mu_l)^\top = (\mu_l, \beta_k) \end{aligned}$$

mit den polaren Winkeln $\mu_l = 10^{-l}$, $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5$, und den äquatorialen Winkeln

$$\begin{aligned} \beta_k &= 10^{-5} + \frac{k}{1000} \pi, & k = 0, 1, \dots, 49, \\ \beta_k &= 10^{-5} + \frac{10(k-50) + 50}{1000} \pi, & k = 50, 51, \dots, 140, \\ \beta_k &= 10^{-5} + \frac{(k+810)}{1000} \pi, & k = 141, 142, \dots, 189. \end{aligned}$$

Der Winkel μ_l ist also der Radius der sphärischen Kappe, auf deren Rand die Ecken $P'_{1,l}$ und $P'_{2,l,k}$ liegen. Der Winkel zwischen den Kanten $G(X_0, P'_{1,l})$ und $G(X_0, P'_{2,l,k})$ ist β_k .

Mit Hilfe der Steigungen m_k der Geraden $g_k(x) = m_k x$ möchten wir in Abbildung 2.1 die Winkel β_k graphisch darstellen. Es gilt

$$\beta_k = \begin{cases} \arctan m_k, & \text{falls } m_k > 0, \\ \pi + \arctan m_k, & \text{falls } m_k < 0. \end{cases}$$

Wie man erkennen kann, interessieren wir uns besonders für kleine Winkel und Winkel nahe π .

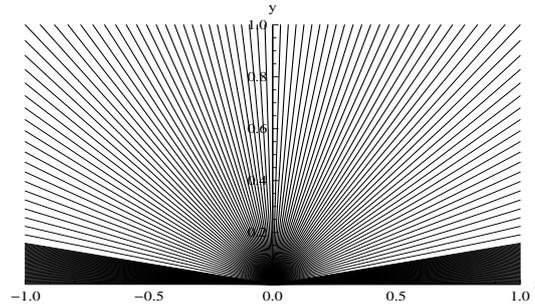


Abbildung 2.1: Darstellung der Winkel β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, der Testdreiecke anhand der Steigungen m_k der Geraden $g_k(x) = m_k x$.

Wir folgen den Schritten in Kapitel 2.3.5 und berechnen die Gewichte und Knoten

$$\mathbf{w}^{(n, \mu_l, 0, \beta_k, \epsilon_{n,l,k})}, \quad \mathbf{x}^{(n, \mu_l, \epsilon_{n,l,k})}$$

(vergleiche (2.58) und (2.59)) für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

2.4.2 Berechnungszeiten

Mit dem Mathematica-Befehl AbsoluteTiming lassen wir Mathematica die bei Ausführung der Berechnung an unseren Testdreiecken verstrichene Sekundenzahl in Echtzeit ausgeben.

Am Beispiel von Polynomgrad $n = 14$ und den Winkeln $\mu_0 = 1$, $\mu_3 = 10^{-3}$ und $\mu_5 = 10^{-5}$ stellen wir die Berechnungszeiten der Gewichte $\mathbf{w}^{(n, \mu_l, 0, \beta_k, \epsilon_{n,l,k})}$ für die Winkel β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, graphisch dar. Für die neun Dreiecke $\Delta(P'_{1,l}, P'_{2,l,k}, X_0)$, $l = 0, 3, 5$, $k = 1, 58, 119$, mit den Winkeln

μ_0	1	1	1
β_k	$10^{-5} + \pi/1000$	$10^{-5} + 13\pi/100$	$10^{-5} + 37\pi/50$
μ_3	10^{-3}	10^{-3}	10^{-3}
β_k	$10^{-5} + \pi/1000$	$10^{-5} + 13\pi/100$	$10^{-5} + 37\pi/50$
μ_5	10^{-5}	10^{-5}	10^{-5}
β_k	$10^{-5} + \pi/1000$	$10^{-5} + 13\pi/100$	$10^{-5} + 37\pi/50$

dabei ist $\beta_1 = 10^{-5} + \pi/1000 \approx 0.0314259$, $\beta_{58} = 10^{-5} + 13\pi/100 \approx 0.408417$, $\beta_{119} = 10^{-5} + 37\pi/50 \approx 2.32479$, plotten wir die Berechnungszeiten für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

Für unsere gewählten Testdaten und Polynomgrade können wir beobachten:

- Die Kurven in Abbildung 2.2 zeigen im Ansatz einen stufenweisen Verlauf. Tendenziell wächst die Zeit mit zunehmendem Winkel β_k immer stärker. Dieser Effekt wird noch verstärkt, wenn die Größe des Radius μ_l reduziert wird.
- Die Berechnungszeit wächst schnell mit dem Polynomgrad.
- Wo deutliche Unterschiede in der Zeit bei verschiedenen Winkeln μ_l zu finden sind (größerer Winkel β_{119}), werden diese durch höhere Polynomgrade n verstärkt (siehe Abbildungen 2.5 und 2.6).
- Der Umstand, dass der kleinere Winkel β_1 eine geringere Berechnungszeit als β_{58} erfordert, dessen Berechnungszeit wiederum geringer als bei β_{119} ausfällt, wird durch die Erhöhung des Polynomgrades verstärkt (siehe Abbildungen 2.3 und 2.4).

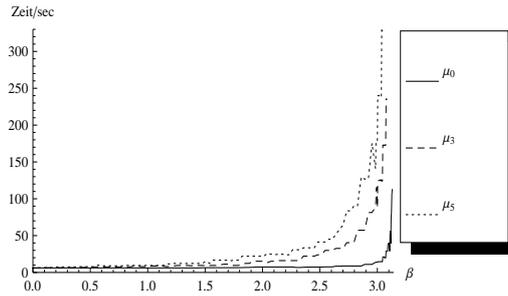


Abbildung 2.2: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,\epsilon_{n,l,k})}$ für die Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$.

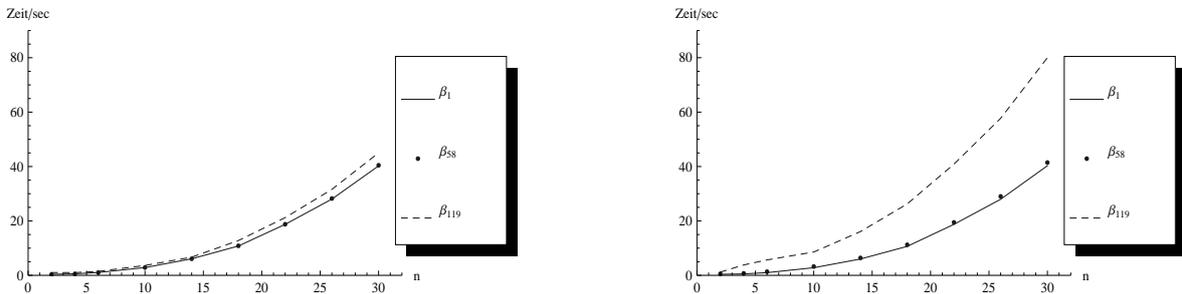


Abbildung 2.3: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit verschiedenen Winkeln β_k , $k = 1, 58, 119$, und μ_l , $l = 0, 3$, für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. **Linkes Bild:** Winkel $\mu_0 = 1$. **Rechtes Bild:** Winkel $\mu_3 = 10^{-3}$.

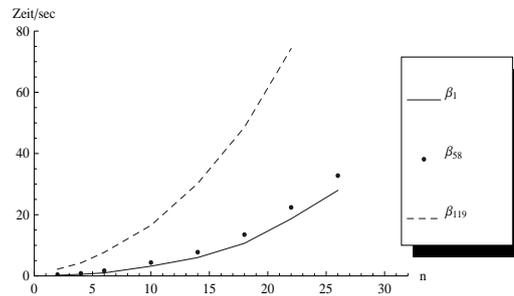


Abbildung 2.4: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_5,0,\beta_k,\epsilon_{n,5,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_5,\epsilon_{n,5,k})}$ der Testdreiecke mit verschiedenen Winkeln β_k , $k = 1, 58, 119$, und Winkel $\mu_5 = 10^{-5}$ für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

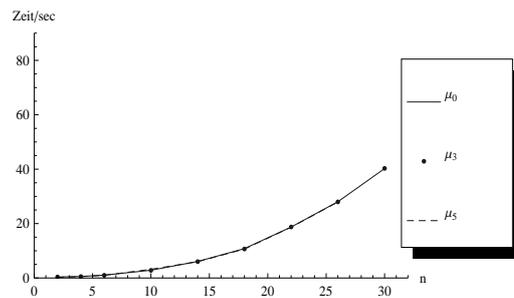


Abbildung 2.5: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_1,\epsilon_{n,l,1})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,\epsilon_{n,l,1})}$ der Testdreiecke mit Winkel β_1 und verschiedenen Winkeln μ_l , $l = 0, 3, 5$, für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

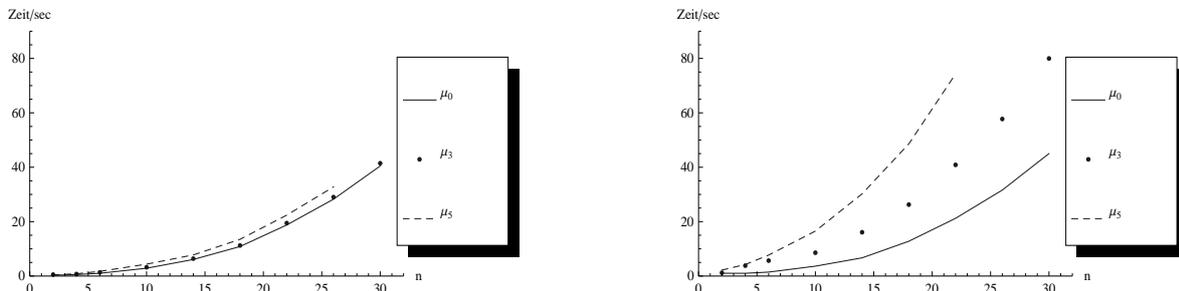


Abbildung 2.6: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit verschiedenen Winkeln μ_l , $l = 0, 3, 5$, und β_k , $k = 58, 119$, für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. **Linkes Bild:** Winkel β_{58} . **Rechtes Bild:** Winkel β_{119} .

2.4.3 Präzisionsverluste

Die Berechnung der Quadraturformel beginnt mit den Gewichten und Knoten aus (2.46) mit Hilfe des Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16). Die Dreiterm-Rekursions-Koeffizienten aus Lemma 1.13 werden im ersten Schritt des Gautschi-Algorithmus symbolisch berechnet. Aus diesen generieren wir reelle Zahlen mit Präzision $p = 400$, das ist unsere sogenannte Startpräzision. Die im Diskretisierungsschritt des Gautschi-Algorithmus benötigten Nullstellen $x_j^{(-1/2)}$ bzw. $x_j^{(1/2)}$, $j = 1, 2, \dots, N$, (vergleiche (1.7)) der Jacobi-Polynome $P_N^{(-1/2,0)}$, $N = 1, 2, \dots, 981$, bzw. $P_N^{(1/2,0)}$, $N = 1, 2, \dots, 648$, aus (1.8) und (1.9) liegen mit Präzision $p + 2/5j$ vorberechnet vor. Wir gleichen mit der Erhöhung der Präzision um jeweils $2/5j$ einen entsprechenden Präzisionsverlust bei Berechnung der Gewichte $w_j^{(-1/2)}$ bzw. $w_j^{(1/2)}$ (vergleiche (1.7)) aus (vergleiche Kapitel 2.3.4). Im Laufe der Berechnung lassen wir Mathematica mit dem Befehl Precision die Präzision von Teilergebnissen bestimmen und beobachten den Verlust an Genauigkeit. Die Präzision $p^{(n,\mu_l,0,\beta_k,400,\epsilon_{n,l,k})}$ der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ stellen wir anhand von Beispielen aus unseren Testdreiecken für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$ dar. Kleinere Werte unter 15 interessieren uns dabei nicht. Wir wählen für unsere Berechnungen zumeist die Startpräzision $p = 400$, um die Vergleichbarkeit der Ergebnisse zu gewährleisten. Der Präzisionsverlust bei Berechnung der Gewichte fällt in der Regel deutlich höher als derjenige bei Berechnung der Knoten aus, daher konzentrieren wir uns auf die graphische Darstellung der Präzision der Gewichte.

- Wenn der Winkel β_k zunimmt, dann erhöhen sich die Präzisionsverluste. Die Präzisionsunterschiede sind dabei aber relativ gering. Eine Vergrößerung des Radius μ_l bringt eine Verringerung der Verluste mit sich (vergleiche Abbildung 2.7, rechtes Bild).
- Die Präzision nimmt linear mit wachsendem Polynomgrad n ab (siehe Abbildung 2.8). Sie nimmt ebenfalls linear mit wachsenden Werten $-\log_{10} \mu_l = l$ ab (siehe 2.7, linkes Bild).
- Unterschiede zwischen der Präzision der Gewichte bei kleineren und größeren β_k bzw. bei kleineren und größeren μ_l verstärken sich mit zunehmendem Polynomgrad n (siehe Abbildung 2.8).

In der Abbildung 2.9 stellen wir einigen Kurven aus den Abbildungen 2.7 und 2.8 die Ergebnisse gegenüber, die wir erhalten, wenn wir die Anfangspräzision um die Hälfte auf $p = 200$ reduzieren (die Präzision der Nullstellen $x_j^{(-1/2)}$ und $x_j^{(1/2)}$, $j = 1, 2, \dots, N$, ist dann dementsprechend $200 + 2/5j$). Die Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ (und Knoten) verringert sich in diesem Fall ebenfalls um die Hälfte (bzw. ist Null, falls der Präzisionsverlust größer oder gleich 200 ist). Wir können also festhalten, dass die Präzision sich linear gegenüber der Startpräzision p verhält.

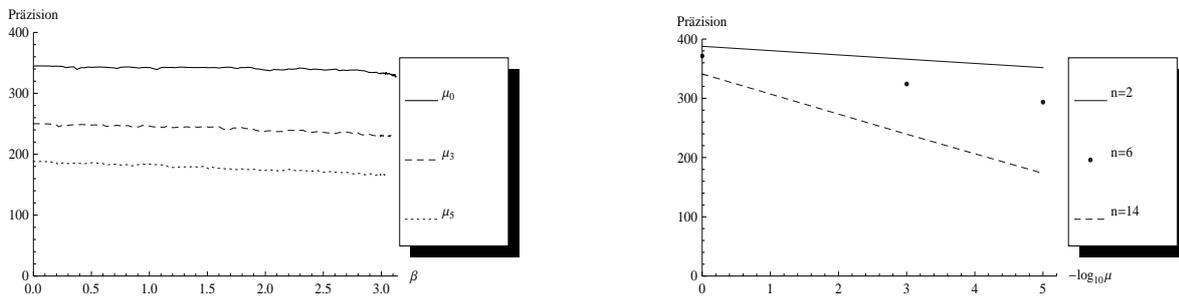


Abbildung 2.7: Linkes Bild: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$ mit der Startpräzision $p = 400$. Rechtes Bild: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ in Abhängigkeit zu $-\log_{10} \mu_l = l$, $l = 0, 3, 5$, dargestellt für Testdreiecke mit Winkel β_{119} bei gegebenen Polynomgraden $n = 2, 6, 14$.

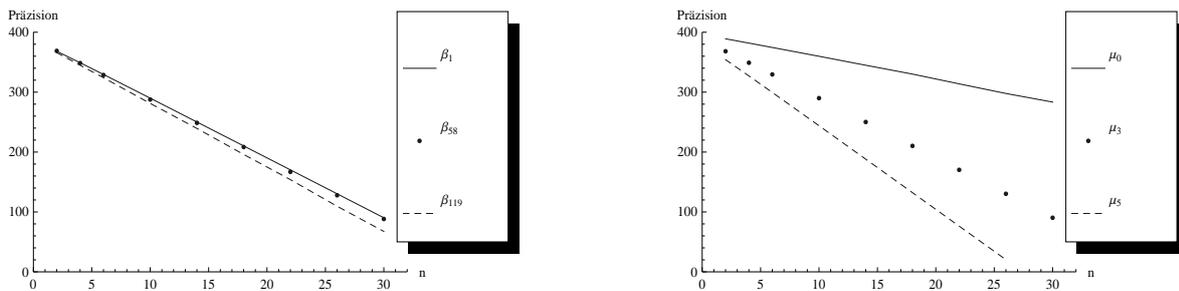


Abbildung 2.8: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$ mit $p = 400$. Linkes Bild: Testdreiecke mit verschiedenen Winkeln β_k , $k = 1, 58, 119$, und Winkel $\mu_3 = 10^{-3}$. Rechtes Bild: Testdreiecke mit verschiedenen Winkeln μ_l , $l = 0, 3, 5$, und Winkel β_1 .

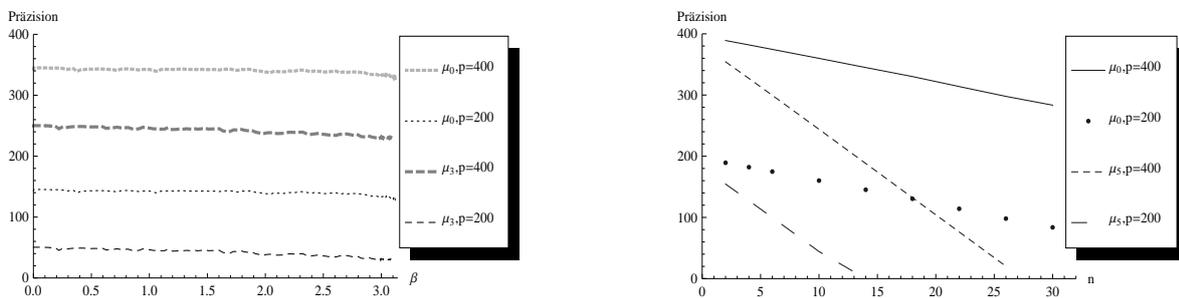


Abbildung 2.9: Linkes Bild: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und Winkeln μ_l , $l = 0, 3$, für Polynomgrad $n = 14$ für zwei verschiedene Startpräzisionen $p = 200, 400$. Rechtes Bild: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_1,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln μ_l , $l = 0, 5$, und β_1 für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$ für zwei verschiedene Startpräzisionen $p = 200, 400$.

Reduzierung der Anfangspräzision

Aufgrund der Linearität der Anfangspräzision können wir, wenn wir den Präzisionsverlust $400 - p^{(n,\mu_l,0,\beta_k,400,\epsilon_{n,l,k})}$ der Berechnung kennen, die Startpräzision so wählen, dass die berechneten Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ eine gewünschte Anzahl an Stellen haben. Geben wir z. B. die Zielpräzision 16 vor, dann ist unsere Startpräzision $\tilde{p}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,400,\epsilon_{n,l,k})} = 16 + 400 - p^{(n,\mu_l,0,\beta_k,400,\epsilon_{n,l,k})}$. Dadurch können wir unsere Testrechnungen beschleunigen. Der Faktor, um den sich die Berechnungszeiten verringern, ist umso höher, je größer der Winkel μ_l oder je kleiner der Polynomgrad n ist (siehe Abbildungen 2.10 und 2.11). In diesen Fällen sind die Präzisionsverluste $p^{(n,\mu_l,0,\beta_k,400,\epsilon_{n,l,k})}$ gering.

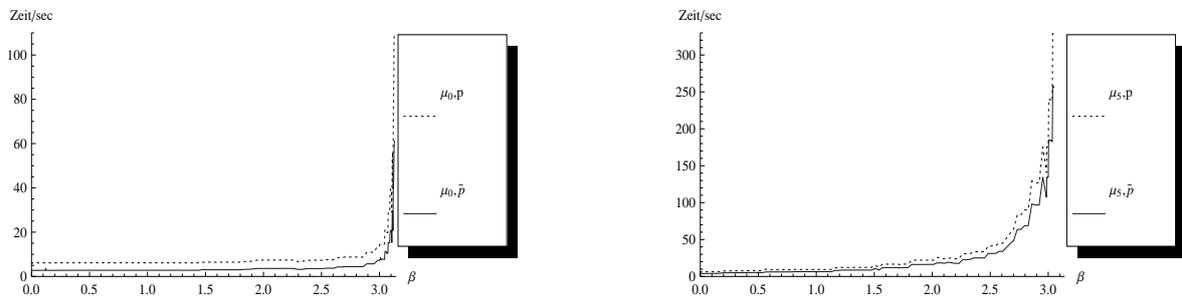


Abbildung 2.10: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$. Die mit p gekennzeichneten Kurven stehen für Anfangspräzision $p = 400$, Kurven mit \tilde{p} für die Berechnung mit reduzierter Anfangspräzision, so dass die Präzision der Gewichte ≈ 16 ist.

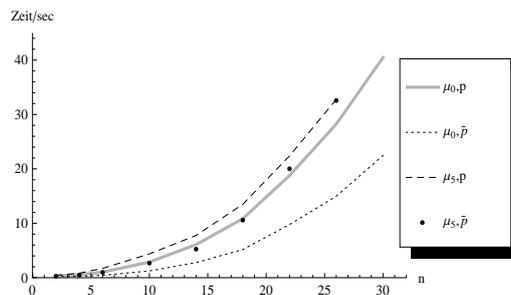


Abbildung 2.11: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_{58},\epsilon_{n,l,58})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,0,\beta_{58},\epsilon_{n,l,58})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln μ_l , $l = 0, 5$, und Winkel β_{58} für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. Die mit p gekennzeichneten Kurven stehen für Anfangspräzision $p = 400$, Kurven mit \tilde{p} für die Berechnung mit reduzierter Anfangspräzision, so dass die Präzision der Gewichte ≈ 16 ist.

Verfahrensfehler

Wir bezeichnen $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,10^{-p})}$ als Testwert, falls der Gautschi-Algorithmus jeweils mit Genauigkeit 10^{-p} , wir wählen dabei eine möglichst große Startpräzision p aus $\{30, 40, 50, \dots, 400\}$, terminiert und die Präzision größer 15 ist. Die Testwerte sind mit einem möglichst kleinen Verfahrensfehler behaftet. Für das Abbruchkriterium des Gautschi-Algorithmus wählen wir dann den größten Wert $\epsilon_{n,l,k} := \epsilon_{\max,n,l,k}$ aus $\{10^{-20}, 10^{-30}, \dots, 10^{-p+10}\}$, bei dem der Fehler

$$E_{2,n,l,k} = \frac{\|\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{\max,n,l,k})} - \mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,10^{-p})}\|_2}{\|\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,10^{-p})}\|_2} < 10^{-16}$$

ist. Hierbei bezeichnet $\|\circ\|_2$ die euklidische Vektornorm.

Einige der Kurven in den Abbildungen brechen vorzeitig, vor Erreichen des Polynomgrades $n = 30$ oder des Winkels β_{189} , ab. Diese Kurven gehören zu Dreiecken, für die wir nicht beurteilen können, ob die berechneten Werte korrekt sind, da uns keine vertrauenswürdigen Testwerte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,10^{-p})}$ zur Verfügung stehen. Um mehr Testwerte zu erhalten, müssten wir die Nullstellen für weitere Jacobi-Polynome $P_N^{(-1/2,0)}$, $N > 981$, vorberechnen und damit verhindern, dass der Gautschi-Algorithmus abbricht, bevor das Abbruchkriterium mit der vorgegebenen Genauigkeit erfüllt ist. Es kann dann sinnvoll sein, Startpräzisionen größer 400 zu erlauben.

2.4.4 Vergleich zwischen Lanczos- und Stieltjes-Algorithmus

Bei unseren bisherigen Berechnungen haben wir im Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16) den Lanczos-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.15) verwendet. Ersetzen wir den Lanczos-Algorithmus durch den Stieltjes-Algorithmus aus Korollar 1.14, so bringt dies eine geringere Berechnungszeit, besonders bei kleinen Winkeln μ_l , größeren β_k und höheren Polynomgraden n (siehe Abbildungen 2.12), mit sich. Während der Stieltjes-Algorithmus $O(nN)$ Additionen und Multiplikationen benötigt, sind es beim Lanczos-Algorithmus $O(N^2)$, dabei ist der Polynomgrad n kleiner oder gleich der Anzahl N der Gauß-Jacobi-Gewichte und -Knoten.

Der Stieltjes-Algorithmus bewirkt bei den meisten Testdaten aber einen höheren Präzisionsverlust als der Lanczos-Algorithmus. Die Unterschiede in der Präzision der Gewichte für einen festen Winkel β_k nehmen mit geringer werdendem Radius zu, wie auch mit zunehmendem Polynomgrad n . Bei festem Winkel $\mu_0 = 1$ nehmen die Präzisionsunterschiede der Gewichte mit größer werdenden Winkeln β_k der Testdreiecke deutlich ab. Für einige Testdreiecke ist die Berechnung der Quadratur mit dem Stieltjes-Algorithmus geringfügig stabiler. Bei kleineren β_k beobachten wir höhere Differenzen in der Präzision der Gewichte zwischen dem Lanczos- und dem Stieltjes-Algorithmus als bei größeren β_k (siehe Abbildung 2.13, linkes Bild). Bei $\mu_3 = 10^{-3}$ und $\mu_5 = 10^{-5}$ hat der Winkel β_k bei Verwendung des Stieltjes-Algorithmus noch weniger Einfluss auf die Präzision als bei Verwendung des Lanczos-Algorithmus (siehe Abbildung 2.13, linkes Bild).

Es kann der Fall eintreten, dass für Dreiecke mit kleineren Winkeln μ_l für einen höheren Polynomgrad n das Verfahren mit dem Stieltjes-Algorithmus keine Gewichte mit genügend großer Präzision liefern kann, das Verfahren mit dem Lanczos-Algorithmus dazu

aber in der Lage ist (siehe Abbildung 2.13, rechtes Bild). Ersetzen wir das Lanczos- oder Stieltjes-Verfahren durch den modifizierten Chebyshev-Algorithmus in [11, S. 295–297] und [12, S. 76–78], so fallen die Präzisionsverluste noch höher als beim Stieltjes-Algorithmus aus.

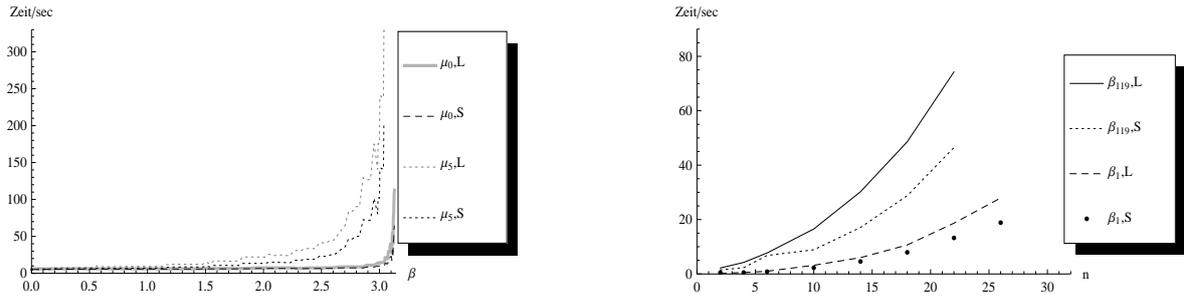


Abbildung 2.12: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ und Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu_l,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit Startpräzision $p = 400$, wobei einmal der Lanczos-Algorithmus ($L=Lanczos$), das andere Mal der Stieltjes-Algorithmus ($S=Stieltjes$) verwendet worden ist. **Linkes Bild:** Testdreiecke mit Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$. **Rechtes Bild:** Testdreiecke mit Winkeln β_k , $k = 1, 119$, und $\mu_5 = 10^{-5}$ für Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

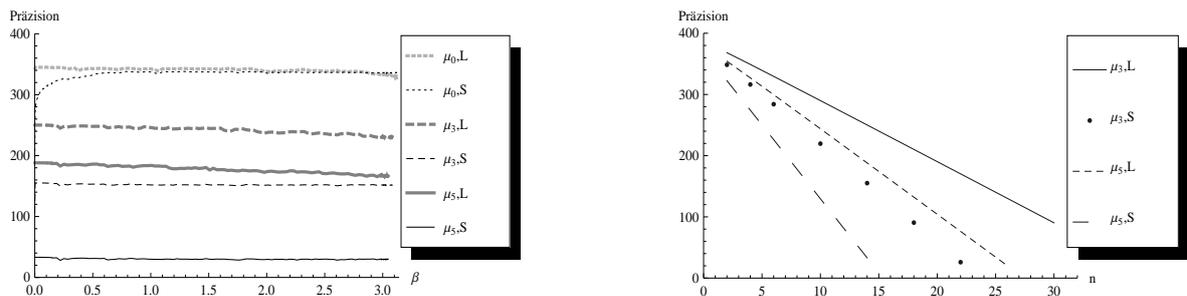


Abbildung 2.13: Präzision der Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_l,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit Startpräzision $p = 400$, wobei einmal der Lanczos-Algorithmus ($L=Lanczos$), das andere Mal der Stieltjes-Algorithmus ($S=Stieltjes$) verwendet worden ist. **Linkes Bild:** Testdreiecke mit Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$. **Rechtes Bild:** Testdreiecke mit Winkeln μ_l , $l = 3, 5$, und β_1 für Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$.

2.4.5 Analyse der Stabilität einzelner Rechenschritte

Bei unseren Testrechnungen haben wir für viele Zwischenergebnisse Mathematica die Präzision bestimmen lassen, um einen Eindruck zu erhalten, welche Berechnungsschritte besonders instabil sind. In diesem Abschnitt möchten wir auf einige der gewonnenen Erkenntnisse eingehen.

Wir betrachten zunächst die Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ aus (2.56) etwas genauer. Das Ausklammern der Matrix $\mathbf{K}_{n,l}$ erweist sich geringfügig für die Präzision und etwas deutlicher für die Berechnungszeit von Vorteil. Mit den Matrizen

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{1,n,l,k} &:= \mathbf{E}_{1,n} \mathbf{R}_{(W_0, -\delta_k, \delta_k, N^{(W_0; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} \hat{\mathbf{D}}_{(W_0, -\delta_k, \delta_k, N^{(W_0; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} (\mathbf{K}_{W_0, n, l, k})^\top, \\ \mathbf{P}_{2,n,l,k} &:= \mathbf{E}_{2,n} \mathbf{R}_{(W_1, -\delta_k, \delta_k, N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} \hat{\mathbf{D}}_{(W_1, -\delta_k, \delta_k, N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} (\mathbf{K}_{W_1, n, l, k})^\top, \\ \mathbf{P}_{3,n,l,k} &:= \mathbf{E}_{3,n} \hat{\mathbf{D}}_{(W_2, -\delta_k, \delta_k, N^{(W_2; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} (\mathbf{K}_{W_2, n, l, k})^\top, \\ \mathbf{P}_{4,n,l,k} &:= \mathbf{E}_{2,n} \mathbf{R} \hat{\mathbf{D}}_{(\omega, -\delta_k, \delta_k, N^{(\omega; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})})} (\mathbf{K}_{\omega, n, k})^\top, \end{aligned}$$

wobei $\delta_k = \beta_k/2$ ist, können wir schreiben

$$\mathbf{K}_{2,n,l,k} = \frac{1}{4n+6} \mathbf{K}_{n,l} \sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}.$$

Die Unterschiede in der Präzision der Faktoren $\mathbf{K}_{n,l}$ und $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$ sind nicht sehr groß, sehr niedrig für kleine β_k , größer für größere Winkel β_k , wobei die Differenzen mit abnehmendem Winkel μ_l zunehmen. Bei der Multiplikation tritt dann aber ein deutlicher Präzisionsverlust auf, der umso höher ist, je kleiner der Radius oder je größer der Winkel β_k oder der Polynomgrad n sind, wie beispielhaft in den Abbildungen 2.14 und 2.15 erkennbar ist. Die Berechnung der Gewichte $\mathbf{w}^{(n, \mu_l, 0, \beta_k, \epsilon_{n,l,k})}$ dagegen erfolgt mit der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ fast ohne Präzisionsverlust.

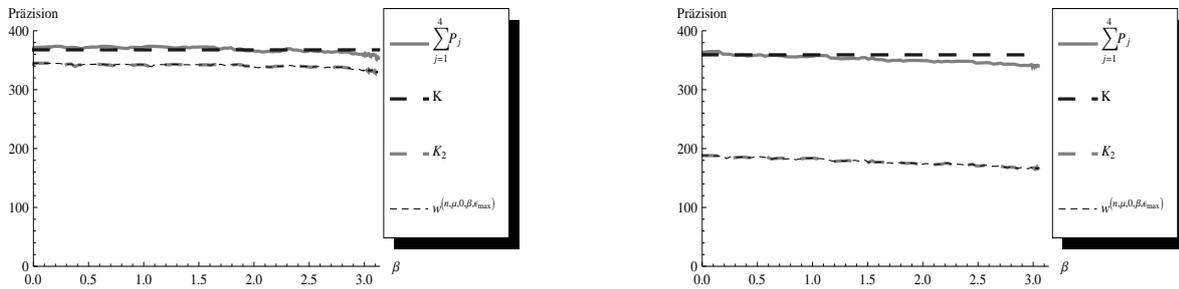


Abbildung 2.14: Präzision der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$, $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$, $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ und der Gewichte $\mathbf{w}^{(n, \mu_l, 0, \beta_k, \epsilon_{n,l,k})}$ der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, für Polynomgrad $n = 14$ und Anfangspräzision $p = 400$. **Linkes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_0 . **Rechtes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_5 .

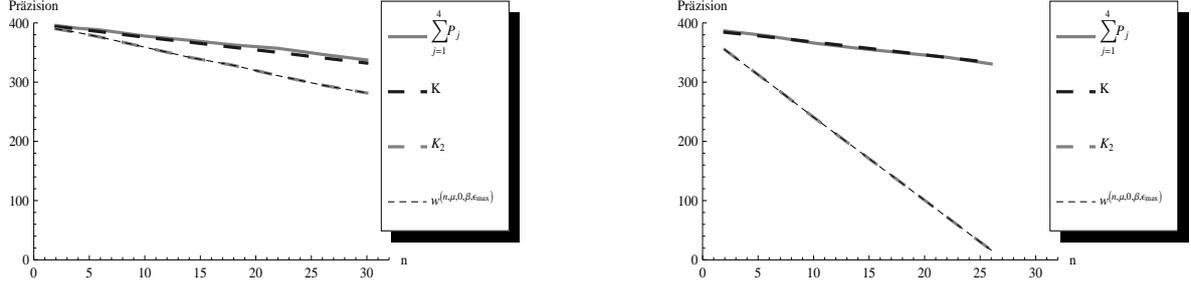


Abbildung 2.15: Präzision der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$, $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$, $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ und Gewichte $\mathbf{w}^{(n,\mu_1,0,\beta_k,\epsilon_{n,l,k})}$ von Testdreiecken für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. **Linkes Bild:** Testdreieck mit den Winkeln μ_0 und β_{58} . **Rechtes Bild:** Testdreieck mit den Winkeln μ_5 , β_{58} .

Im Folgenden versuchen wir einen kleinen Eindruck über die Größenordnung der Summanden bei Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ zu vermitteln.

Die Einträge der Vektoren

$$\left((\mathbf{K}_{n,l})_{r,q} \left(\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k} \right)_{q,s} \right)_{q=1}^{2n+3}, \quad r = 1, 2, \dots, 2(n+2), \quad s = 1, 2, \dots, 2(n+1),$$

sind die Summanden, die bei der Multiplikation der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$ und $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$, addiert werden. Sie seien die Einträge der Vektoren $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$, dabei in jedem Vektor in kanonischer Reihenfolge angeordnet. D. h. $(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k})_j \leq (\mathbf{S}_{r,s,n,l,k})_k$, $j < k$. Wir bestimmen für jeden Vektor den kleinsten und größten Summanden, bilden die jeweiligen Mittelwerte über alle Vektoren $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$ und erhalten

$$S_{\max,n,l,k} := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \max(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}),$$

$$S_{\min,n,l,k} := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \min(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}).$$

Es sei $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+ \in \mathbb{R}^{m_{n,l,k}^+}$ der Vektor mit den positiven und $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^- \in \mathbb{R}^{m_{n,l,k}^-}$ derjenige mit den negativen Einträgen des Vektors $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$, ihre Einträge sind ebenfalls kanonisch angeordnet. Unter dem Median des Vektors $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+$ verstehen wir den Wert

$$\text{median}(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+) := \begin{cases} \frac{1}{2}((\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+)_{m_{n,l,k}^+/2} + (\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+)_{m_{n,l,k}^+/2+1}), & \text{falls } m_{n,l,k}^+ \text{ gerade,} \\ (\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+)_{(m_{n,l,k}^++1)/2}, & \text{falls } m_{n,l,k}^+ \text{ ungerade.} \end{cases}$$

Analog dazu definieren wir den Median des Vektors $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^- \in \mathbb{R}^{m_{n,l,k}^-}$. Die jeweiligen Mittelwerte über alle Vektoren $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$ sind dann

$$S_{\text{med},n,l,k}^+ := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \text{median}(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^+),$$

$$S_{\text{med},n,l,k}^- := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \text{median}(\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}^-).$$

Wir summieren die Einträge aller Vektoren $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$ bis auf den letzten auf, bilden wiederum die Mittelwerte über alle Vektoren $\mathbf{S}_{r,s,n,l,k}$ und bezeichnen diese Summen mit

$$\tilde{S}_{n,l,k} := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \sum_{q=1}^{2n+2} (\mathbf{S}_{r,s,n,l,k})_q.$$

Zum Schluss ermitteln wir noch den Durchschnitt

$$\bar{K}_{2,n,l,k} := \frac{1}{4(n+2)(n+1)} \sum_{r=1}^{2(n+2)} \sum_{s=1}^{2(n+1)} \sum_{q=1}^{2n+3} (\mathbf{K}_{n,l})_{r,q} \left(\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k} \right)_{q,s}$$

der Einträge der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$.

Die zu den berechneten Werten zugehörigen Kurven für verschiedene Testdreiecke $\Delta_{l,k}$ und Polynomgrade n stellen wir in den Abbildungen 2.16 und 2.17 graphisch dar. Die Werte $\log_{10} S_{\text{med},n,l,k}^+$ und $\log_{10}(-S_{\text{med},n,l,k}^-)$ unterscheiden sich kaum. Die Größenordnung der Mittelwerte der maximalen Summanden, $\log_{10} S_{\text{max},n,l,k}$, der minimalen Summanden, dargestellt als $\log_{10}(-S_{\text{min},n,l,k})$, und der Teilsommen, dargestellt als $\log_{10}(-\tilde{S}_{n,l,k})$, entsprechen in etwa einander. Im Vergleich dazu sind Werte der Summen, geplottet als $\log_{10} \bar{K}_{2,n,l,k}$, deutlich geringer.

Man kann sich bei diesen Größenordnungen der Maxima, Minima und Mediane sehr gut vorstellen, dass Auslöschung von Stellen ein Problem darstellt, die zu Präzisionsverlusten führt. Die Addition der Teilsommen mit den Maxima stellen einen besonders ungünstigen Fall dar. Die Unterschiede in den Größenordnungen zwischen Summanden und Summe nehmen mit kleiner werdendem Radius μ_l oder zunehmendem Polynomgrad n zu, was sich in den Präzisionsverlusten widerspiegelt. Es sei noch angemerkt, dass die Einträge der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$ deutlich größer als diejenigen der Matrizen $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$ sind.

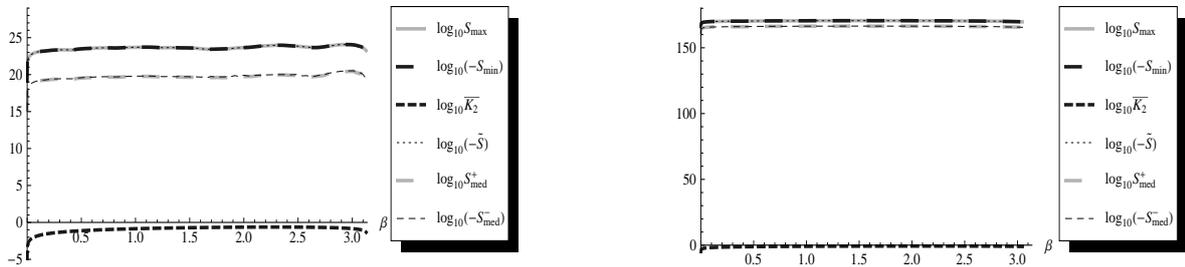


Abbildung 2.16: Werte $\log_{10} S_{\text{med},n,l,k}^+$, $\log_{10}(-S_{\text{med},n,l,k}^-)$, $\log_{10} S_{\text{max},n,l,k}$, $\log_{10}(-S_{\text{min},n,l,k})$, $\log_{10}(-\tilde{S}_{n,l,k})$ und $\log_{10} \bar{K}_{2,n,l,k}$ der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, für Polynomgrad $n = 14$ und Anfangspräzision $p = 400$. **Linkes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_0 . **Rechtes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_5 .

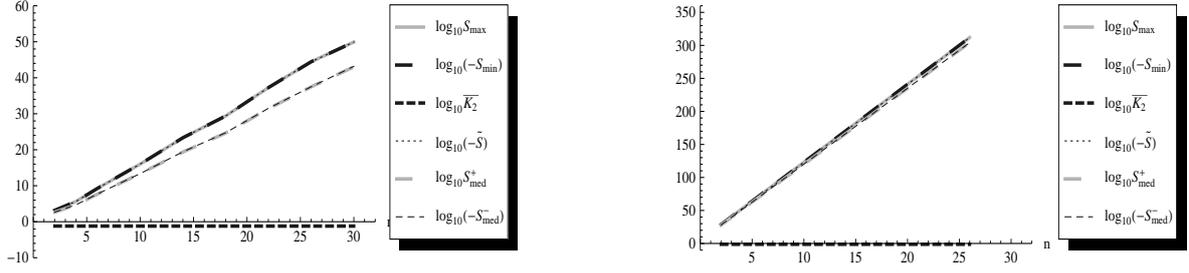


Abbildung 2.17: Werte $\log_{10} S_{med,n,l,k}^+$, $\log_{10}(-S_{med,n,l,k}^-)$, $\log_{10} S_{max,n,l,k}$, $\log_{10}(-S_{min,n,l,k})$, $\log_{10}(-\tilde{S}_{n,l,k})$ und $\log_{10} \bar{K}_{2,n,l,k}$ von Testdreiecken für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. **Linkes Bild:** Testdreieck mit den Winkeln μ_0 und β_{58} . **Rechtes Bild:** Testdreieck mit den Winkeln μ_5 , β_{58} .

In den Abbildungen 2.14 und 2.15 erkennen wir nicht nur den Präzisionsverlust bei der Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$, sondern auch, dass die Berechnung der Faktoren nicht ohne Verlust an Stellen erfolgt ist. So ergibt bei Polynomgrad $n = 14$ und Radius μ_0 die Matrizenmultiplikation einen Verlust an Präzision von ungefähr 30, aber auch bei Berechnung der Einträge der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$ und $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$ sind etwa 30 Stellen verloren gegangen. Während bei den Radien μ_3 und μ_5 die Präzision der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ im Vergleich zu μ_0 deutlich niedriger ist, nimmt der Stellenverlust bei der Berechnung der Matrizen $\mathbf{K}_{n,l}$ und $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$ in diesen Fällen aber vergleichsweise gering zu. Schon die Gewichte und Knoten

$$\lambda_{j,N(\hat{\omega};a,b,\epsilon)}^{(\hat{\omega};a,b)}, \quad t_{j,N(\hat{\omega};a,b,\epsilon)}^{(\hat{\omega};a,b)} + \frac{a+b}{2}, \quad j = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil,$$

mit

$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega};a,b,\epsilon)$	m	$\omega_1(\circ) = \hat{\omega}(\circ)(1 - \circ^2)^{1/2}$
ω	0	μ_l	$N(\omega;0,\mu_l,\epsilon_{n,l,k})$	$2n+3$	1
W_0	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_0;-\delta_k,\delta_k,\epsilon_{n,l,k})$	$2n+1$	$(\tan^2 \mu_l \cos^2 \delta_k + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}$
W_1	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_1;-\delta_k,\delta_k,\epsilon_{n,l,k})$	$2n+1$	$(\tan^2 \mu_l \cos^2 \delta_k + \circ^2)^{-\lfloor \frac{n+2}{2} \rfloor + \frac{1}{2}}$
W_2	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_2;-\delta_k,\delta_k,\epsilon_{n,l,k})$	n	$\arctan(\tan \mu_l \cos \delta_k / \circ)$
ω	$-\delta_k$	δ_k	$N(\omega;-\delta_k,\delta_k,\epsilon_{n,l,k})$	n	1

(vergleiche 2.46) können wir mit dem Gautschi-Algorithmus nicht ohne Präzisionsverluste berechnen. Man kann zusammenfassend feststellen, dass diese Verluste durch einen kleinen Radius, relativ großen Polynomgrad n oder von großen Winkeln β_k , falls es eine Abhängigkeit von β_k gibt, begünstigt werden.

Der Informationsverlust kann in den weiteren Berechnungsschritten nicht ausgeglichen werden, wir beobachten außerdem zusätzliche Stellenverluste beim Aufstellen der Matrizen $\mathbf{P}_{(\omega;0,\mu_l,N(\omega;0,\mu_l,\epsilon_{n,l,k}))}^{(\omega;\cos(\mu_l/2),1,N_1^{(\omega;0,\mu_l,\epsilon_{n,l,k}))})}$ aus (2.47) und $\mathbf{P}_{(\omega;0,\mu_l,N(\omega;0,\mu_l,\epsilon_{n,l,k}))}^{(\hat{\omega};\cos(\mu_l/2),1,N_2^{(\hat{\omega};0,\mu_l,\epsilon_{n,l,k}))})}$ aus (2.48) bzw. $\mathbf{P}_{(\hat{\omega};a,b,N(\hat{\omega};a,b,\epsilon))}^{(\omega;-1,1)}$ aus (2.54) und $\mathbf{P}_{(\hat{\omega};a,b,N(\hat{\omega};a,b,\epsilon))}^{(\hat{\omega};-1,1)}$ aus (2.55)

mit

$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$	m
W_0	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_0; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	$2n + 1$
W_1	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	$2n + 1$
W_2	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_2; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	n
ω	$-\delta_k$	δ_k	$N(\omega; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	n

Mit zunehmendem Polynomgrad n erhöhen sich die Präzisionsverluste, mit denen die Matrizen $\mathbf{P}_{(\omega; \cos(\mu_l/2), 1, N_1^{(\omega; 0, \mu_l, \epsilon_{n,l,k})})}$ und $\mathbf{P}_{(\hat{\omega}; \cos(\mu_l/2), 1, N_2^{(\hat{\omega}; 0, \mu_l, \epsilon_{n,l,k})})}$ bestimmt werden. Die Matrix $\mathbf{K}_{n,l}$ kann dann aber ohne nennenswerten weiteren Präzisionsverlust berechnet werden (vergleiche (2.49)).

Die Präzision der Matrizen $\mathbf{P}_{1,n,l,k}$ und $\mathbf{P}_{2,n,l,k}$ ist geringer als diejenige der Matrizen $\mathbf{P}_{3,n,l,k}$ und $\mathbf{P}_{4,n,l,k}$. Bei der Berechnung der Summe $\sum_{j=1}^4 \mathbf{P}_{j,n,l,k}$ verlieren wir weitere Stellen zunehmend mit abnehmendem Radius μ_l .

2.4.6 Analyse teurer Rechenschritte

Wir haben Mathematica ausgeben lassen, wie viel Zeit die einzelnen Berechnungsschritte benötigten. Welche der Rechenschritte sind teuer in Abhängigkeit von dem Polynomgrad n , dem Radius μ_l und dem Winkel β_k ?

Die Berechnungszeiten für die Quadraturformeln

$$\lambda_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)}, \quad t_{j, N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)}^{(\hat{\omega}; a, b)} + \frac{a + b}{2}, \quad j = -\left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil, \dots, -1, 1, \dots, \left\lceil \frac{m+1}{2} \right\rceil,$$

aus (2.46) bezeichnen wir im Einzelnen, $\delta_k = \beta_k/2$, mit

t	$\hat{\omega}$	a	b	$N(\hat{\omega}; a, b, \epsilon)$	m	$\omega_1(o) = \hat{\omega}(o)(1 - o^2)^{1/2}$
t_2	ω	0	μ_l	$N(\omega; 0, \mu_l, \epsilon_{n,l,k})$	$2n + 3$	1
t_3	W_2	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_2; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	n	$\arctan(\tan \mu_l \cos \delta_k / o)$
t_4	W_1	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	$2n + 1$	$(\tan^2 \mu_l \cos^2 \delta_k + o^2)^{-\lfloor \frac{n+2}{2} \rfloor + \frac{1}{2}}$
t_5	W_0	$-\delta_k$	δ_k	$N(W_0; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	$2n + 1$	$(\tan^2 \mu_l \cos^2 \delta_k + o^2)^{-\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor}$
t_6	ω	$-\delta_k$	δ_k	$N(\omega; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})$	n	1

Weitere Berechnungszeiten sind

- t_7 , für die Berechnung der Gewichte $\lambda_s^{(\omega; -\pi, \pi)}$ und Knoten $t_s^{(\omega; -\pi, \pi)}$, $s = -(n + 1), \dots, -1, 1, \dots, (n + 1)$ (vergleiche Quadraturformel aus (2.19)),
- t_{14} , für Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ in (2.56),
- t_{ges} , als Gesamtberechnungszeit,
- t_{Rest} , als Berechnungszeit der übrigen Schritte, $t_{\text{Rest}} = t_{\text{ges}} - t_{14} - \sum_{j=2}^7 t_j$.

In unseren Beispielrechnungen sind die Berechnung der Quadraturformeln aus (2.46) und (2.19), zusammengenommen, und die Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ teuer. Welcher Schritt dabei am meisten Zeit braucht, hängt von den Winkeln μ_l , β_k und dem Polynomgrad n ab. Grob gesagt, gehen ein kleinerer Winkel μ_l und ein größerer Winkel β_k auf Kosten der Berechnung der Quadraturformeln, auch bei höheren Polynomgraden n , während eine Erhöhung des Polynomgrades die Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ verlangsamt, besonders, wenn bei größeren Winkeln μ_l kleinere Winkel β_k vorliegen (vergleiche die Abbildungen 2.18 und 2.19). Die Anzahl der Multiplikationen und Additionen bei der Berechnung der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ liegt in der Größenordnung $O(n^3)$.

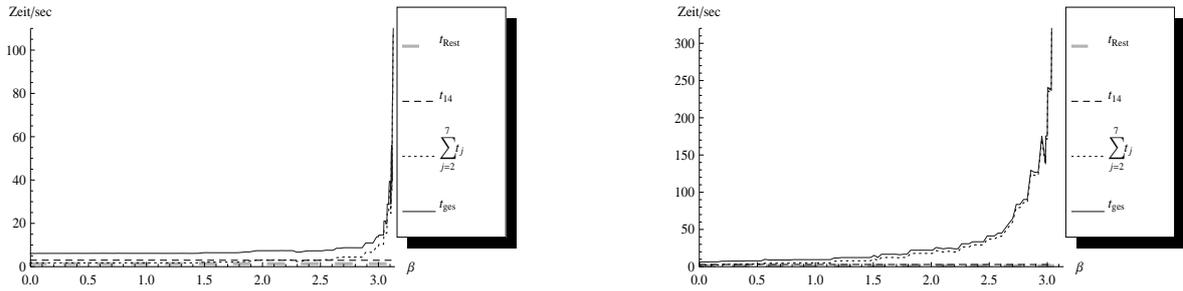


Abbildung 2.18: Berechnungszeiten der Quadraturformeln aus (2.46) und (2.19) ($\sum_{j=2}^7 t_j$), der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ in (2.56) (t_{14}), der übrigen Rechenschritte (t_{Res}) und der Gesamtberechnungszeit (t_{ges}) der Quadraturformel der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, für Polynomgrad $n = 14$ und Anfangspräzision $p = 400$. **Linkes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_0 . **Rechtes Bild:** Testdreiecke mit Winkel μ_5 .

Verantwortlich für die Abhängigkeit der Berechnungszeiten t_{ges} von der Geometrie der Dreiecke sind die Zeiten der Berechnung der Gewichte und Knoten aus (2.46). Mit zunehmendem Winkel β_k wachsen hauptsächlich die Zeiten t_4 und t_5 , die etwa gleich lang sind, ein wenig geringer auch die Zeiten t_3 . Der Effekt nimmt durch die Verringerung des Radius μ_l zu. Für kleinere Winkel β_k und größere Winkel μ_l ist der Anteil von t_2 an der Zeit $\sum_{j=2}^7 t_j$ gleich groß oder sogar höher als der von t_4 bzw. t_5 , t_2 ist unabhängig von β_k .

In der Abbildung 2.20 stellen wir am Beispiel der Quadraturformel aus (2.24) die Berechnungszeiten t_4 den Diskretisierungsparametern $N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}$, bei denen der Gautschi-Algorithmus im Laufe der Berechnung dieser Gewichte und Knoten terminiert ist, gegenüber. Der Quadraturfehler, mit dem die Quadraturformel behaftet ist, ist begründet auf den Quadraturfehlern aus (2.39),

$$\tilde{E}_{N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}}(f_{\cos \delta_k, -1/2, r}(\eta)), \quad r = 0, 1, \dots, 2n + 1,$$

wobei

$$\begin{aligned} & f_{\cos \delta_k, -1/2, r}(\eta) \\ &= \phi_{\cos \delta_k}^r(\eta) (T_{\Delta(P'_1, P'_{2,k}, X_0)}^2 + \phi_{\cos \delta_k}^r(\eta))^{-\lfloor (n+1)/2 \rfloor + 1/2} (1 + \phi_{\cos \delta_k}^r)^{-1/2}. \end{aligned}$$

Untersuchungen mit Mathematica zeigen, dass, wenn die Winkel β_k , damit δ_k , an Größe gewinnen und die Radien μ_l an Größe verlieren, höhere Diskretisierungsparameter nötig

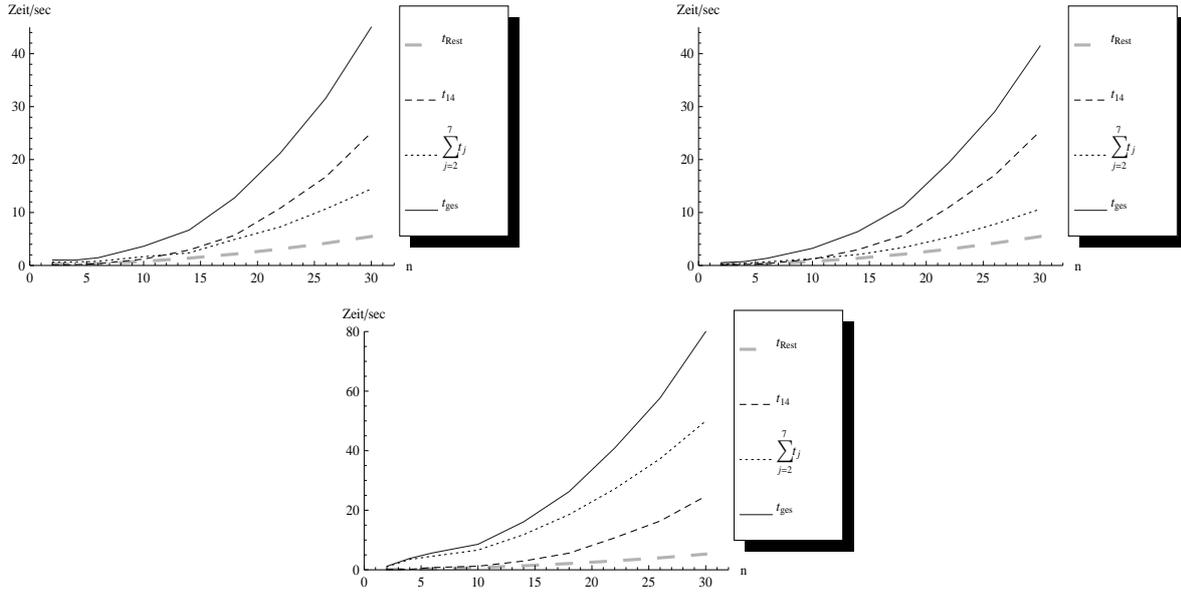


Abbildung 2.19: Berechnungszeiten der Quadraturformeln aus (2.46) und (2.19) ($\sum_{j=2}^7 t_j$), der Matrix $\mathbf{K}_{2,n,l,k}$ in (2.56) (t_{14}), der übrigen Rechenschritte (t_{Rest}) und der Gesamtberechnungszeit (t_{ges}) der Quadraturformel von Testdreiecken für die Polynomgrade $n = 2, 4, 6, 10, 14, 18, 22, 26, 30$. **Linkes Bild oben:** Testdreieck mit den Winkeln μ_0 und β_{119} . **Rechtes Bild oben:** Testdreieck mit den Winkeln μ_3 , β_{58} . **Bild unten:** Testdreieck mit den Winkeln μ_3 , β_{119} .

sind, damit der Fehler

$$E_N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})} \approx \max_{0 \leq r \leq 2n+1} \sup_{-1 < \eta < 1} |\tilde{E}_N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}(f_{\cos \delta_k, -1/2, r}(\eta))|$$

genügend klein ist. In der Folge terminiert der Gauschi-Algorithmus erst bei höheren Werten $N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}$ (diese werden stufenweise in jedem Iterationsschritt erhöht, dabei werden die Stufen mit jedem Schritt höher). Mehr Iterationsschritte und höhere Parameter $N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}$ erhöhen die Berechnungszeiten.

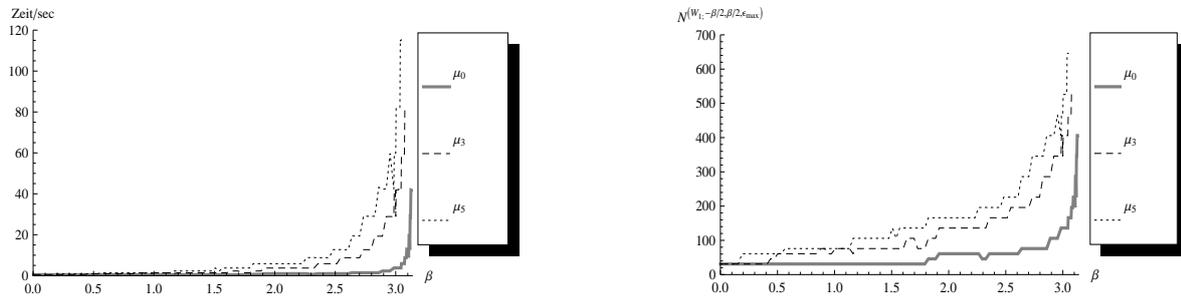


Abbildung 2.20: Berechnungszeit t_4 der Quadraturformel aus (2.24) (**linkes Bild**) und die Parameter $N^{(W_1; -\delta_k, \delta_k, \epsilon_{n,l,k})}$, bei denen der Gauschi-Algorithmus im Laufe der Berechnung dieser Gewichte und Knoten terminiert ist (**rechtes Bild**), der Testdreiecke mit den Winkeln β_k , $k = 0, 1, \dots, 189$, und μ_l , $l = 0, 3, 5$, für Polynomgrad $n = 14$ und Anfangspräzision $p = 400$.

2.5 Testrechnungen für beliebige sphärische Dreiecke

Wir wollen die Quadraturformel über sphärische Dreiecke nun an Dreiecken, die nicht gleichschenkelig sind, testen.

2.5.1 Testdaten

Die Ecken der Testdreiecke $\Delta(P_{1,r}, P_{2,r,l}, P_{3,r,l,k})$ bezeichnen wir mit

$$\begin{aligned} P_{1,r} &= (\sin \mu_r, 0, \cos \mu_r)^\top, \\ P_{2,r,l} &= (\sin \mu_r \cos a_l, \sin \mu_r \sin a_l, \cos \mu_r)^\top, \\ P_{3,r,l,k} &= (\sin \mu_r \cos b_{l,k}, \sin \mu_r \sin b_{l,k}, \cos \mu_r)^\top. \end{aligned}$$

Die Dreiecke liegen in der Kappe $\mathbb{S}_{\mu_r}^2(X_0)$, wir variieren den Radius zwischen $\mu_0 = 1$, $\mu_3 = 10^{-3}$ und $\mu_5 = 10^{-5}$.

Zu jedem Winkel $a_l = \frac{2l\pi}{10}$, $l = 1, 2, 3, 4$, wählen wir acht Winkel $b_{l,k}$, $a_l < b_{l,k} < 2\pi$, $k = 1, 2, \dots, 8$, mit $b_{l,k} < b_{l,s}$, $k < s$.

Insgesamt erhalten wir 96 Dreiecke $\Delta(P_{1,r}, P_{2,r,l}, P_{3,r,l,k})$, die wir kurz mit $\Delta_{r,l,k}$, $r = 0, 3, 5$, $l = 1, 2, 3, 4$, $k = 1, 2, \dots, 8$, oder auch mit $\Delta_{r,j(l,k)} = \Delta_{r,j}$, $j = 1, 2, \dots, 32$, bezeichnen, dabei ist $j(l, k) = 8(l - 1) + k$. Die Indizes l und k lassen sich mit $l = \lfloor (j - 1)/8 \rfloor + 1$ und $k = ((j - 1) \bmod 8) + 1$ wieder aus j ermitteln.

Konkret wählen wir für die $b_{l,k}$ der Dreiecke $\Delta_{r,l,k}$ mit Radius $\mu_r = 10^{-r}$ und Winkel a_l die Winkel

$\Delta_{r,1}$	$\Delta_{r,2}$	$\Delta_{r,3}$	$\Delta_{r,4}$	$\Delta_{r,5}$	$\Delta_{r,6}$	$\Delta_{r,7}$	$\Delta_{r,8}$
$\Delta_{r,1,1}$	$\Delta_{r,1,2}$	$\Delta_{r,1,3}$	$\Delta_{r,1,4}$	$\Delta_{r,1,5}$	$\Delta_{r,1,6}$	$\Delta_{r,1,7}$	$\Delta_{r,1,8}$
$b_{1,1}$	$b_{1,2}$	$b_{1,3}$	$b_{1,3}$	$b_{1,5}$	$b_{1,6}$	$b_{1,7}$	$b_{1,8}$
$\frac{3\pi}{10}$	$\frac{6\pi}{10}$	$\frac{8\pi}{10}$	$\frac{9\pi}{10}$	$\pi - 10^{-1}$	$\pi + 10^{-1}$	$\frac{21\pi}{20}$	$\frac{11\pi}{10} - 10^{-2}$

$\Delta_{r,9}$	$\Delta_{r,10}$	$\Delta_{r,11}$	$\Delta_{r,12}$	$\Delta_{r,r,13}$	$\Delta_{r,14}$	$\Delta_{r,15}$	$\Delta_{r,16}$
$\Delta_{r,2,1}$	$\Delta_{r,2,2}$	$\Delta_{r,2,3}$	$\Delta_{r,2,4}$	$\Delta_{r,2,5}$	$\Delta_{r,2,6}$	$\Delta_{r,2,7}$	$\Delta_{r,2,8}$
$b_{2,1}$	$b_{2,2}$	$b_{2,3}$	$b_{2,3}$	$b_{2,5}$	$b_{2,6}$	$b_{2,7}$	$b_{2,8}$
$\frac{13\pi}{20}$	$\frac{7\pi}{10}$	$\frac{8\pi}{10} + 10^{-2}$	$\frac{9\pi}{10}$	$\pi - 10^{-1}$	$\pi + 10^{-1}$	$\frac{11\pi}{10}$	$\frac{12\pi}{10} - 10^{-2}$

$\Delta_{r,17}$	$\Delta_{r,18}$	$\Delta_{r,19}$	$\Delta_{r,20}$	$\Delta_{r,21}$	$\Delta_{r,22}$	$\Delta_{r,23}$	$\Delta_{r,24}$
$\Delta_{r,3,1}$	$\Delta_{r,3,2}$	$\Delta_{r,3,3}$	$\Delta_{r,3,4}$	$\Delta_{r,3,5}$	$\Delta_{r,3,6}$	$\Delta_{r,3,7}$	$\Delta_{r,3,8}$
$b_{3,1}$	$b_{3,2}$	$b_{3,3}$	$b_{3,3}$	$b_{3,5}$	$b_{3,6}$	$b_{3,7}$	$b_{3,8}$
$\frac{8\pi}{20}$	$\frac{9\pi}{10}$	$\frac{95\pi+1}{100}$	$\pi - 10^{-1}$	$\pi + 10^{-1}$	$\frac{11\pi}{10}$	$\frac{12\pi}{10} + 10^{-2}$	$\frac{13\pi}{10} - 10^{-2}$

$\Delta_{r,25}$	$\Delta_{r,26}$	$\Delta_{r,27}$	$\Delta_{r,28}$	$\Delta_{r,29}$	$\Delta_{r,30}$	$\Delta_{r,31}$	$\Delta_{r,32}$
$\Delta_{r,4,1}$	$\Delta_{r,4,2}$	$\Delta_{r,4,3}$	$\Delta_{r,4,4}$	$\Delta_{r,4,5}$	$\Delta_{r,4,6}$	$\Delta_{r,4,7}$	$\Delta_{r,4,8}$
$b_{4,1}$	$b_{4,2}$	$b_{4,3}$	$b_{4,3}$	$b_{4,5}$	$b_{4,6}$	$b_{4,7}$	$b_{4,8}$
$\frac{9\pi}{10}$	$\frac{19\pi}{20}$	$\pi - 10^{-1}$	$\pi + 10^{-1}$	$\frac{11\pi}{10}$	$\frac{12\pi}{10} - 10^{-2}$	$\frac{13\pi}{10}$	$\frac{14\pi}{10} - 10^{-2}$

Im Dreieck $\Delta_{r,l,k}$ ist die Summe der Innenwinkel höher als im Dreieck $\Delta_{r,l,s}$, $k < s$, damit sind auch die Dreiecksfläche $F_{r,l,k}$ (ist gleich der Summe der Innenwinkel minus Winkel π , siehe Kapitel 1.1) und das Verhältnis Dreiecksfläche zu Kappenfläche $A_r = 2\pi(1 - \cos \mu_r)$, $F_{r,l,k}/A_r$, größer als die entsprechenden Werte des Dreiecks $\Delta_{r,l,s}$ (siehe Abbildung 2.21).

Wir berechnen für unsere Testdreiecke $\Delta_{r,j}$ bei gegebenen Polynomgraden $n = 2, 3, 4, 5, 6$ die Quadraturgewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ und die Quadraturknoten $\mathbf{x}_{n,r}$ und nutzen wieder Mathematica 7 auf einem Rechner mit AMD Athlon(tm) 64 Prozessor 3000+, 2009.75 MHz Geschwindigkeit, mit 997.5 MB RAM und SUSE-Linux 11.2 (Kernel 2.6.27.7-9-pae i686).

Anmerkung zur Realisierung der Berechnung

Die Winkel der Dreiecke $\Delta_{r,j}$ liegen als Dezimalzahlen mit 16 Stellen vor. Mit dem Mathematica-Befehl Rationalize werden sie mit Genauigkeit 10^{-16} in rationale und anschließend in Dezimalzahlen mit Präzision 400 umgewandelt. Wir drehen die Dreiecke um die z-Achse jeweils so, dass die Ecke $P_{1,r}$ auf den Punkt $P'_{1,r} = (-\sin \mu_r, 0, \cos \mu_r)^\top$ abgebildet wird (siehe Kapitel 2.2.3). Danach können sie in drei gleichschenklige Teildreiecke $\Delta_{r,j}^{(1)}$, $\Delta_{r,j}^{(2)}$, $\Delta_{r,j}^{(3)}$, wie in Kapitel 2.2.2 beschrieben, aufgeteilt werden, und die äquatorialen Winkel der Dreiecksecken auf dem Kappenrand werden bestimmt (der polare Winkel dazu ist ja der Radius der Kappe, der Nordpol ist die gemeinsame Ecke der Teildreiecke). Für jedes der Teildreiecke suchen wir aus einer vorberechneten Liste einen möglichst geeigneten ϵ -Wert für den Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16) heraus, hier mit $\epsilon_{n,r,j}^{(1)}$, $\epsilon_{n,r,j}^{(2)}$ und $\epsilon_{n,r,j}^{(3)}$ bezeichnet. Bevor die eigentliche Berechnung startet, werden die äquatorialen Winkel der Ecken jedes Dreiecks $\Delta_{r,j}^{(s)}$ mit Genauigkeit $\epsilon_{n,r,j}^{(s)}$, $s = 1, 2, 3$, in rationale Zahlen umgewandelt, der Radius mit Genauigkeit $\min(\epsilon_{n,r,j}^{(1)}, \epsilon_{n,r,j}^{(2)}, \epsilon_{n,r,j}^{(3)})$.

Wir folgen im Wesentlichen den Schritten aus Kapitel 2.3.5 zur Berechnung der Gewichte und Knoten für die Teildreiecke, berücksichtigen aber, dass Rechenschritte nur einmal ausgeführt werden müssen, wenn die Resultate dieser Schritte nur vom Polynomgrad n oder dem Radius μ_r abhängen. Die Knoten aus (2.59) sind allen Teildreiecken gemeinsam, es sind unsere Knoten $\mathbf{x}_{n,r}$.

Die Einträge der Matrix $\mathbf{K}_{n,r}$ aus (2.49) hängen, was die Geometrie betrifft, nur vom Radius ab und brauchen daher nur einmal berechnet zu werden. Auch die Matrizen $\mathbf{E}_{1,n}$, $\mathbf{E}_{2,n}$, $\mathbf{E}_{3,n}$ und \mathbf{R}_n (vergleiche (2.50) bis (2.53)) sind allen Teildreiecken gemeinsam. Für jedes Teildreieck $\Delta_{r,j}^{(s)}$ bestimmen wir die Matrix $\tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(s)}$ aus (2.57), und anschließend könnten wir die Matrizen $\mathbf{K}_{2,n,r,j}^{(s)} = 1/(4n+6)\mathbf{K}_{n,r}\tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(s)}$ (vergleiche (2.56)) berechnen. Wir gehen einen etwas anderen Weg, um die Anzahl der Rechenoperationen zu verringern: Je nachdem, wie die Dreiecke aufgeteilt werden können, sind die Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ des Dreiecks $\Delta_{r,j}$ gleich der Summe der Teilgewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}^{(1)} + \mathbf{w}_{n,r,j}^{(2)} + \mathbf{w}_{n,r,j}^{(3)}$ (Nordpol liegt im Dreieck) oder gleich $\mathbf{w}_{n,r,j}^{(2)} + \mathbf{w}_{n,r,j}^{(3)} - \mathbf{w}_{n,r,j}^{(1)}$ (Nordpol liegt außerhalb des Dreiecks) (siehe Kapitel 2.2.2). Je nach Lage des Nordpols zum Dreieck $\Delta_{r,j}$ berechnen wir dann $1/(4n+6)\mathbf{K}_{n,r}(\tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(1)} + \tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(2)} + \tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(3)})$ oder $1/(4n+6)\mathbf{K}_{n,r}(\tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(2)} + \tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(3)} - \tilde{\mathbf{P}}_{n,r,j}^{(1)})$. Ein letzter Schritt (vergleiche 2.58) liefert dann unsere Quadraturgewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$.

Wir bestimmen die aus der Aufteilung in die Teildreiecke $\Delta_{r,j}^{(1)}$, $\Delta_{r,j}^{(2)}$, $\Delta_{r,j}^{(3)}$ resultierenden Winkel (Differenz der äquatorialen Winkel der Ecken der Teildreiecke auf dem Kappenrand) am Nordpol und bezeichnen sie entsprechend mit $\beta_{\min,j}$, β_j , $\beta_{\max,j}$, $\beta_{\min,j} \leq \beta_j \leq \beta_{\max,j}$. Liegt der Nordpol innerhalb des Dreiecks, dann ist $\beta_{\min,j} + \beta_j + \beta_{\max,j} = 2\pi$, liegt der Nordpol außerhalb, dann ist $\beta_{\min,j} + \beta_j = \beta_{\max,j}$.

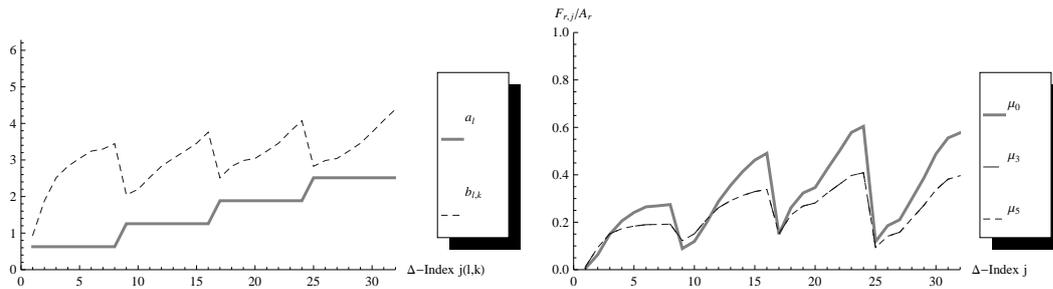


Abbildung 2.21: Linkes Bild: Darstellung der Winkel a_l und $b_{l,k}$ der Testdreiecke $\Delta_{r,l,k} = \Delta_{r,j(l,k)} = \Delta_{r,j}$, $j = 1, 2, \dots, 32$. Rechtes Bild: Verhältnis der Dreiecksfläche $F_{r,j}$ der Testdreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, $j = 1, 2, \dots, 32$, zur Fläche der Kappe $\mathbb{S}_{\mu_r}^2(X_0)$ mit Radius μ_r , in der die Testdreiecke liegen.

2.5.2 Berechnungszeiten

In Abbildung 2.22 stellen wir die Berechnungszeiten bei gegebenem Polynomgrad $n = 4$ und die zu den Dreiecken $\Delta_{r,j}$ zugehörigen Winkel am Nordpol, $\beta_{\max,j}$, β_j , $\beta_{\min,j}$, graphisch dar. Nähert sich $\beta_{\max,j}$ dem Winkel π an, dann steigt die Berechnungszeit deutlich an. Der Anstieg ist umso höher, je kleiner μ_r ist. Unsere Testrechnungen an gleichschenkligen Dreiecken ließen diese Beobachtungen erwarten. Mit Erhöhung des Polynomgrades n nehmen tendenziell die Berechnungszeiten zu und das umso stärker, je kleiner der Radius und je näher β_{\max} dem Winkel π ist. Abbildung 2.23 zeigt dies am Beispiel der Dreiecke $\Delta_{r,10}$, $\Delta_{r,19}$, $\Delta_{r,28}$, $r = 0, 3, 5$, die unterschiedlich große Winkel $\beta_{\max,10} \approx 2.1991$, $\beta_{\max,19} \approx 2.9845$ und $\beta_{\max,28} \approx 3.0416$ aufweisen.

2.5.3 Präzision

Die Differenz zwischen der Ausgangspräzision 400 und der Präzision der Gewichte (siehe Abbildung 2.24) ist ein Maß für den Stellenverlust, der mit der Berechnung der Gewichte einhergeht. Ein deutlich kleinerer Radius führt zu einem spürbaren größeren Präzisionsverlust der Gewichte. Mit Zunahme des Polynomgrades n nimmt die Präzision linear ab.

Wie vielen Ziffern der übriggebliebenen Stellen der Berechnungsergebnisse können wir vertrauen? Wir haben bei den Berechnungen der Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}^{(1)}$, $\mathbf{w}_{n,r,j}^{(2)}$ und $\mathbf{w}_{n,r,j}^{(3)}$ der Teildreiecke $\Delta_{1,n,r,j}^{(1)}$, $\Delta_{n,r,j}^{(2)}$, $\Delta_{n,r,j}^{(3)}$ die jeweiligen Parameter im Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16), $\epsilon_{1,n,r,j}^{(1)}$, $\epsilon_{n,r,j}^{(2)}$, $\epsilon_{n,r,j}^{(3)}$, mit möglichst großen Zehnerpotenzen aus

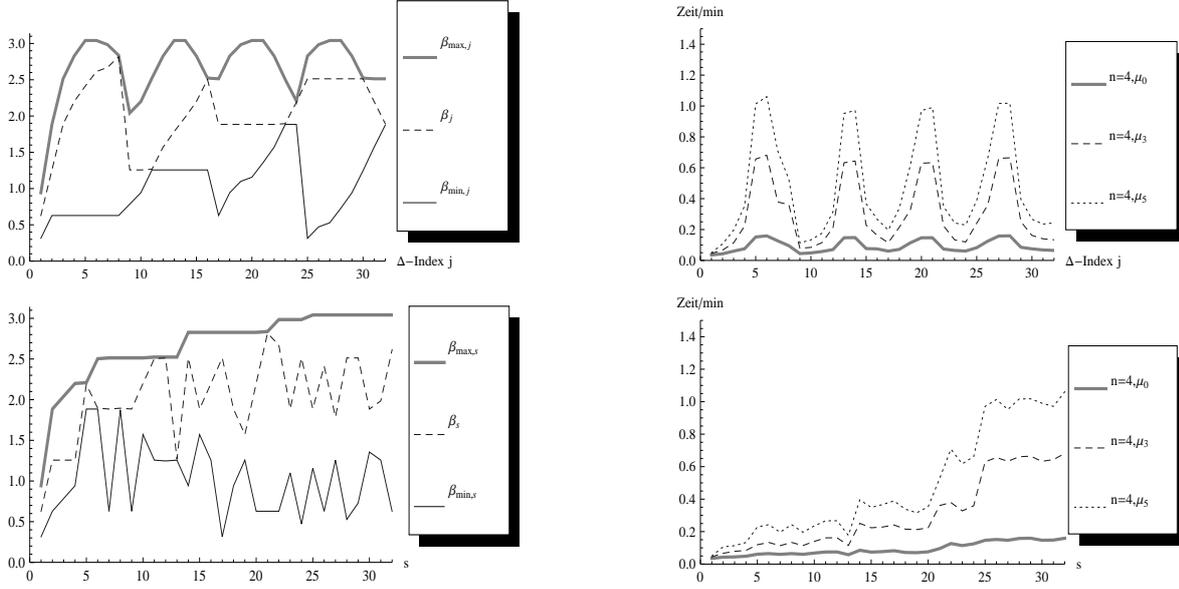


Abbildung 2.22: Bild oben links: Darstellung der Winkel $\beta_{\max,j}$, β_j , $\beta_{\min,j}$ der Testdreiecke $\Delta_{r,j}$ nach Aufteilung in Teildreiecke. Bild oben rechts: Berechnungszeit der Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ und Knoten $\mathbf{x}_{n,r}$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$. Bild unten links: Darstellung der inneren Winkel $\beta_{\max,s}$, kanonisch geordnet, mit den zugehörigen Winkeln β_s , $\beta_{\min,s}$. Bild unten rechts: Berechnungszeiten der Gewichte und Knoten der zu $\beta_{\max,s}$ zugehörigen Dreiecke $\Delta_{r,s}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$.

$\{10^{-390}, 10^{-380}, \dots, 10^{-30}, 10^{-20}\}$ so eingestellt, dass

$$E_{F,n,r,j}^{(s)} = \frac{\|\mathbf{K}_{2,n,r,j}^{(s)} - \tilde{\mathbf{K}}_{2,n,r,j}^{(s)}\|_F}{\|\tilde{\mathbf{K}}_{2,n,r,j}^{(s)}\|_F} \leq 10^{-25}, \quad s = 1, 2, 3. \quad (2.60)$$

Dabei wird $\mathbf{K}_{2,n,r,j}^{(s)}$ (vergleiche (2.56)) mit Parameter $\epsilon_{n,r,j}^{(s)}$, die Matrix $\tilde{\mathbf{K}}_{2,n,r,j}^{(s)}$ aber mit Parameter $(\epsilon_{n,r,j}^{(s)})^2$ berechnet, und $\|\circ\|_F$ bezeichnet die Frobenius-Norm (siehe z. B. [31, S. 31]). Damit ist $E_{F,n,r,j}^{(s)}$ ein Maß für den Verfahrensfehler bei der Berechnung der Gewichte der Teildreiecke. Abbildung 2.25 zeigt am Beispiel von Polynomgrad $n = 4$, wie groß dann

$$E_{2,n,r,j} = \frac{\|\mathbf{w}_{n,r,j} - \tilde{\mathbf{w}}_{n,r,j}\|_2}{\|\tilde{\mathbf{w}}_{n,r,j}\|_2}$$

für die Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ ist, wenn wir bei ihrer Berechnung diese Parameter $\epsilon_{n,r,j}^{(s)}$, $s = 1, 2, 3$, und bei Bestimmung von $\tilde{\mathbf{w}}_{n,r,j}$ entsprechend die Parameter $(\epsilon_{s,n,r,j}^{(s)})^2$ wählen und $\|\circ\|_2$ die euklidische Vektornorm ist. Wir können davon ausgehen, dass mindestens 25 Stellen der Mantisse der Gewichte (und der Knoten) korrekt sind.

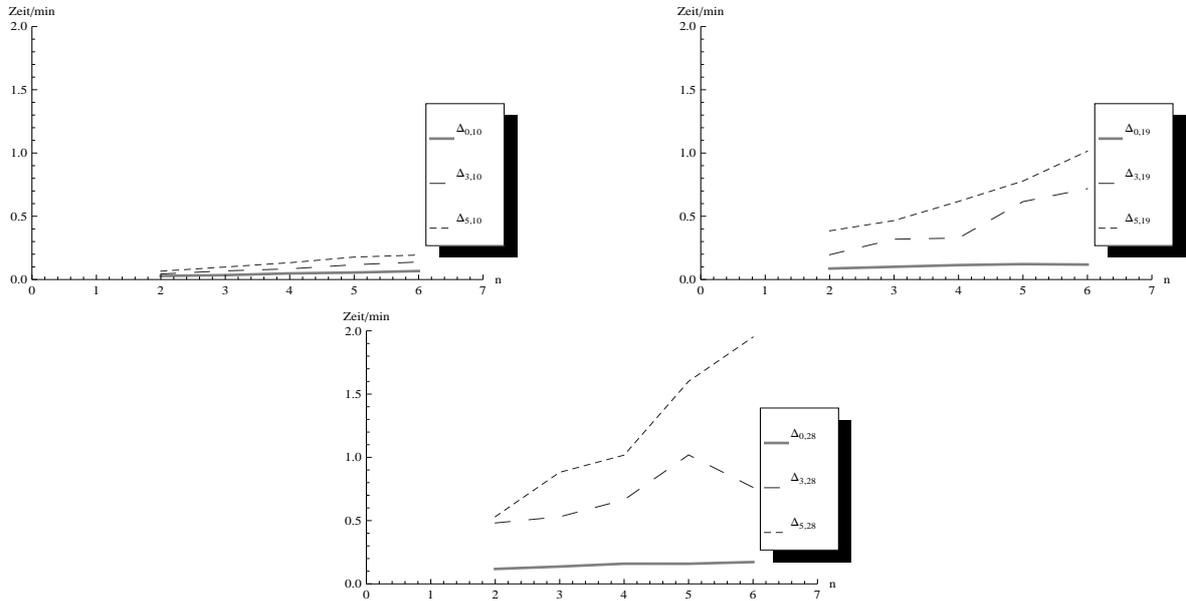


Abbildung 2.23: Berechnungszeiten der Gewichte $w_{n,r,j}$ und Knoten $x_{n,r}$ in Abhängigkeit vom Polynomgrad $n = 2, 3, 4, 5, 6, 8$ für die Dreiecke $\Delta_{r,10}$ (oben links), $\Delta_{r,19}$ (oben rechts), $\Delta_{r,28}$ (unten), $r = 0, 3, 5$.

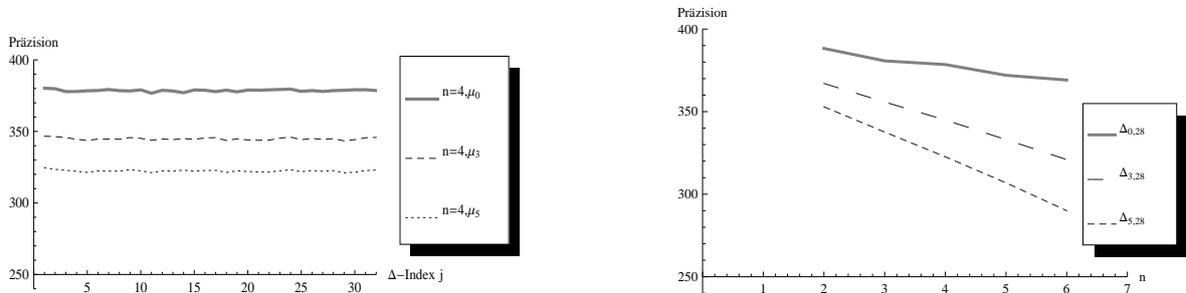


Abbildung 2.24: Linkes Bild: Präzision der Gewichte $w_{n,r,j}$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$. Rechtes Bild: Präzision der Gewichte in Abhängigkeit vom Polynomgrad $n = 2, 3, 4, 5, 6$ für die Dreiecke $\Delta_{r,28}$, $r = 0, 3, 5$.

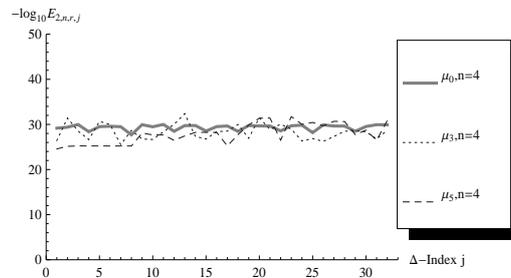


Abbildung 2.25: Fehler $-\log_{10} E_{2,n,r,j}$ der Gewichte $w_{n,r,j}$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$.

2.5.4 Bewertung der Quadraturformel

Unsere Quadraturformel liefert für ein sphärisches Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ Gewichte w_j und Knoten \mathbf{x}_j , $j = 1, \dots, 4(n+2)(n+1)$, so dass Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ exakt integriert werden. Konvergiert unsere Quadraturformel bei wachsender Knotenzahl auch gegen das Integral $\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} f(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x})$ mit einer beliebigen stetigen Funktion f über das Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$? Falls alle Quadraturgewichte nichtnegativ sind, dann ist die Quadraturformel konvergent (siehe [27, S. 114, 149–152, 156]). Das ist auch der Fall, falls es eine Konstante c gibt, so dass

$$\sum_{j=1}^{4(n+2)(n+1)} |w_j| \leq c \quad \text{für alle } n = 1, 2, \dots$$

Legen wir das Konvergenzverhalten als Kriterien fest, nach dem wir eine Quadraturregel bewerten, dann bevorzugen wir Quadraturformeln mit nichtnegativen Gewichten. Kommen negative Gewichte vor, dann sollten die Anzahl der negativen Gewichte im Vergleich zu derjenigen der nichtnegativen und die Absolutbeträge der negativen Gewichte möglichst klein sein. Die Summe $\sum_{j=1}^{N^-} |w_j^-|$, wobei N^- die Anzahl der negativen Gewichte und w_j^- die negativen Gewichte seien, sollte also möglichst klein sein.

Wir interessieren uns im Folgenden dafür, wie groß Anzahl und Wert der negativen Gewichte für unsere Dreiecke $\Delta_{r,j}$ sind und ob zwischen der Geometrie der Dreiecke und Anzahl bzw. Wert der negativen Gewichte ein Zusammenhang besteht.

Abbildung 2.26 stellt die Anzahl der negativen Gewichte für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$ für Polynomgrad $n = 4$ dar, daneben zeigen wir noch einmal das Bild zu den Quotienten $F_{r,j}/A_r$ aus Abbildung 2.21. Ist z. B. für Radius μ_r der Flächeninhalt des Dreiecks, $F_{r,j}$, klein im Verhältnis zum Flächeninhalt der Kappe, $A_r = 2\pi(1 - \cos \mu_r)$, dann muss tendenziell mit einer größeren Anzahl an negativen Gewichten gerechnet werden, als bei Dreiecken, deren Flächeninhalt im Vergleich zur Kappenfläche relativ groß ist. Mit $\Delta_{5,1}$, $\Delta_{5,9}$ und $\Delta_{5,23}$ liegen Dreiecke vor, bei denen wir unterschiedliche Werte $F_{5,j}/A_5$ vorfinden, nämlich $F_{5,1}/A_5 \approx 0.01397$, $F_{5,9}/A_5 \approx 0.1221$, $F_{5,23}/A_5 \approx 0.3971$. Der prozentuale Anteil der negativen Gewichte an der Gesamtzahl der Gewichte nimmt mit Zunahme des Quotienten ab, $N_{n,5,1}^- = 47.50\%$, $N_{n,5,9}^- = 43.33\%$, $N_{n,5,23}^- = 16.67\%$ bei Polynomgrad $n = 4$ (siehe Abbildung 2.28).

Liegen nur nichtnegative Gewichte vor, dann ist natürlich $S_n := \sum_{j=1}^{4(n+2)(n+1)} |w_j|$ gleich dem Flächeninhalt F des sphärischen Dreiecks, d. h. $S_n/F = 1$. Wir bestimmen für unsere Testdreiecke $\Delta_{r,j}$ die Quotienten $S_{n,r,j}/F_{r,j}$ und stellen sie in Abbildung 2.27 für Polynomgrad $n = 4$ graphisch dar. Die Quotienten sind alle ungleich Eins. Bei den Dreiecken, deren Dreiecksfläche $F_{r,j}$ im Verhältnis zur Kappenfläche A_r , im Vergleich mit den anderen Dreiecken, besonders gering ist, findet sich ein vergleichsweise höherer Differenzwert $S_{n,r,j}/F_{r,j} - 1$. Kurven in Abbildung 2.28 stellen die Werte $S_{n,r,j}/F_{r,j}$ der Dreiecke $\Delta_{5,1}$, $\Delta_{5,9}$ und $\Delta_{5,23}$ für kleine Polynomgrade $n = 2, 3, 4, 5, 6$ dar. Eine Änderung des Polynomgrades in diesem Bereich hat auf den Quotienten keinen großen Einfluss.

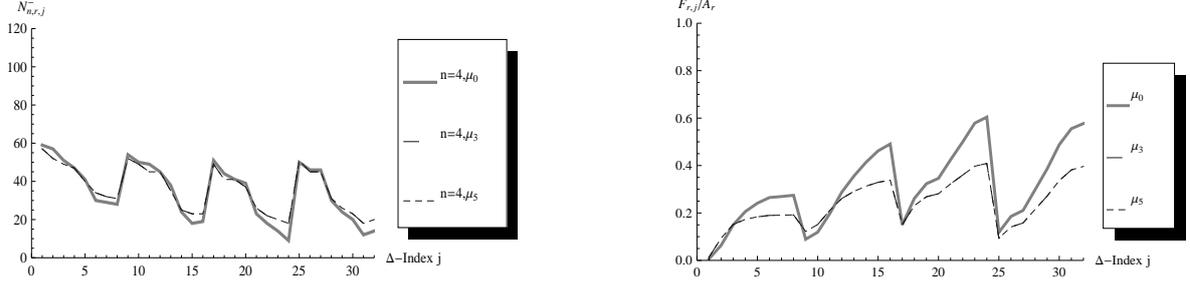


Abbildung 2.26: Bild links: Anzahl der negativen Gewichte, $N_{n,r,j}^-$, bei 120 Gewichten insgesamt für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$. Bild rechts: Darstellung des Verhältnisses des Flächeninhaltes $F_{r,j}$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$ zum Flächeninhalt A_r der sphärischen Kappen, in denen sie liegen.

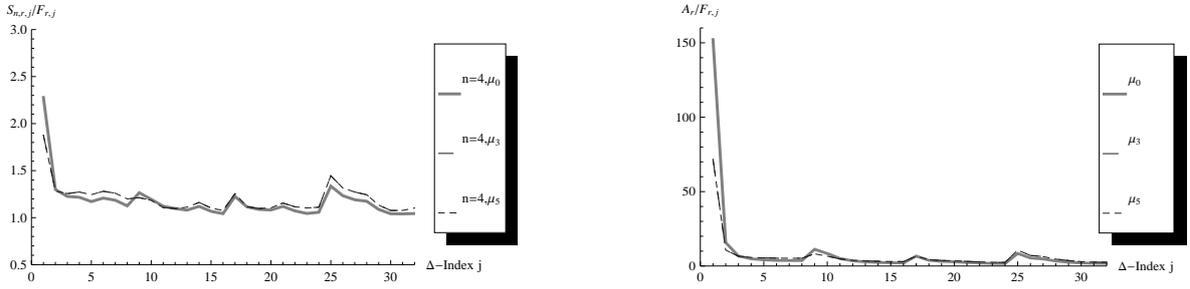


Abbildung 2.27: Bild links: Summe $S_{n,r,j}/F_{r,j}$ für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$, bei Polynomgrad $n = 4$. Bild rechts: Darstellung des Verhältnisses des Flächeninhaltes A_r der Kappen zum Flächeninhalt $F_{r,j}$ der Dreiecke.

Um einen kleinen Einblick zu erhalten, wie es um die Größenordnung der Gewichte bestellt ist, zeigen wir die Abbildungen 2.29. Für die Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ der Testdreiecke $\Delta_{r,j}$, dabei sind $\mathbf{w}_{n,r,j}^+$ die nichtnegativen Gewichte und $\mathbf{w}_{n,r,j}^-$ die negativen, bestimmen wir

- das Maximum der Gewichte, $w_{\max,n,r,j}^+$, und das Minimum der Gewichte, $w_{\min,n,r,j}^-$,
- das arithmetische Mittel der nichtnegativen Gewichte, $\bar{w}_{n,r,j}^+ := 1/N_{n,r,j}^+ \sum_{s=1}^{N_{n,r,j}^+} w_{n,r,j,s}^+$, und der negativen Gewichte, $\bar{w}_{n,r,j}^- := 1/N_{n,r,j}^- \sum_{s=1}^{N_{n,r,j}^-} w_{n,r,j,s}^-$,
- die Standardabweichung für die nichtnegativen Gewichte, $\sigma_{n,r,j}^+ := \left(1/(N_{n,r,j}^+ - 1) \sum_{s=1}^{N_{n,r,j}^+} (w_{n,r,j,s}^+ - \bar{w}_{n,r,j}^+)^2 \right)^{1/2}$, den mittleren Fehler für die negativen Gewichte, $\sigma_{n,r,j}^- := \left(1/(N_{n,r,j}^- - 1) \sum_{s=1}^{N_{n,r,j}^-} (w_{n,r,j,s}^- - \bar{w}_{n,r,j}^-)^2 \right)^{1/2}$.

Zusätzlich ermitteln wir, nachdem wir die Gewichte $\mathbf{w}_{n,r,j}$ so sortiert haben, dass $w_{n,r,j,s} \leq w_{n,r,j,s+1}$, $s = 1, 2, \dots, 4(n+2)(n+1) - 1$, den Median für die nichtnegativen Gewichte

$$w_{\text{med},n,r,j}^+ := \begin{cases} \frac{1}{2}(w_{n,r,j,N_{n,r,j}^+/2}^+ + w_{n,r,j,N_{n,r,j}^+/2+1}^+), & \text{falls } N_{n,r,j}^+ \text{ gerade,} \\ w_{n,r,j,(N_{n,r,j}^++1)/2}^+, & \text{falls } N_{n,r,j}^+ \text{ ungerade,} \end{cases}$$

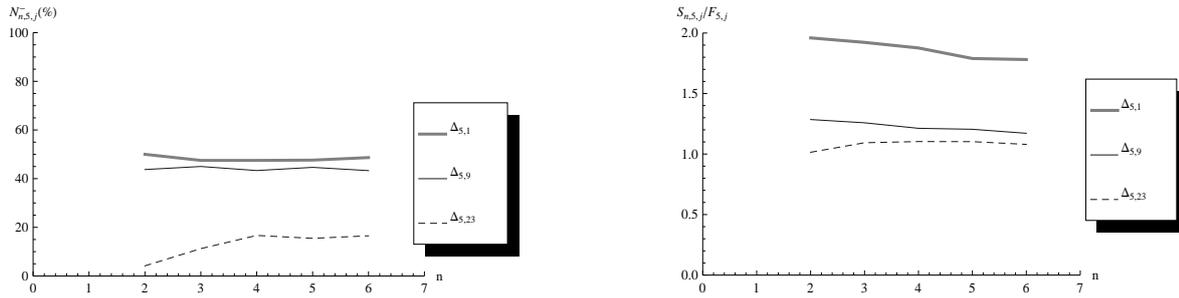


Abbildung 2.28: Bild links: Prozentualer Anteil der negativen Gewichte, $N_{n,r,j}^-$, an der Gesamtzahl der Gewichte und Knoten, $4(n+2)(n+1)$, und Bild rechts: Summe $S_{n,5,j}/F_{5,j}$ abhängig vom Polynomgrad $n = 2, 3, 4, 5, 6$ für die Dreiecke $\Delta_{5,1}$, $\Delta_{5,9}$, $\Delta_{5,23}$.

und analog dazu den Median $w_{\text{med},n,r,j}^-$ der negativen Gewichte.

Wir beobachten an unseren Beispielen, dass

- die Absolutbeträge der Minima der Gewichte kleiner als die Maxima der Gewichte sind, wie auch die Beträge der negativen Mittelwerte bzw. Mediane kleiner als die positiven Mittelwerte bzw. Mediane sind; sie unterscheiden sich aber nur um höchstens Faktor 20.
- bei Verringerung des Radius um Faktor 10^{-3} (10^{-5}) die Größenordnung der Gewichte um Faktor 10^{-6} (10^{-10}) reduziert wird;
- die Standardabweichungen für die verschiedenen Dreiecke zwar nicht gleich sind, sich aber, mit Ausnahme der Dreiecke $\Delta_{r,1}$, keine großen Unterschiede in den mittleren Fehlern zeigen;
- die positiven Durchschnittswerte (positiven Mediane) größer, die negativen Durchschnittswerte (negativen Mediane) eher niedriger bei Dreiecken sind, deren Quotient $F_{r,j}/A_r$ höher ist, als bei Dreiecken, bei denen das Verhältnis von Dreiecksfläche zu Kappenfläche geringer ist. Bei höherem Quotienten $F_{r,j}/A_r$ ist dann aber auch die Anzahl der negativen Gewichte tendenziell geringer, wie auch die Differenz $S_{n,r,j}/F_{r,j} - 1$.
- ein höherer Polynomgrad erwartungsgemäß zu kleineren Maxima, positiven Durchschnittswerten, positiven Standardabweichungen und positiven Medianwerten führt, wobei die dazu analogen negativen Werte größer werden.

2.6 Quadratur über die Sphäre

Für die Integrale über die Sphäre mit den Spherical Harmonics Y_s gilt

$$\int_{\mathbb{S}^2} Y_s(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \begin{cases} \sqrt{4\pi}, & \text{falls } s = 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

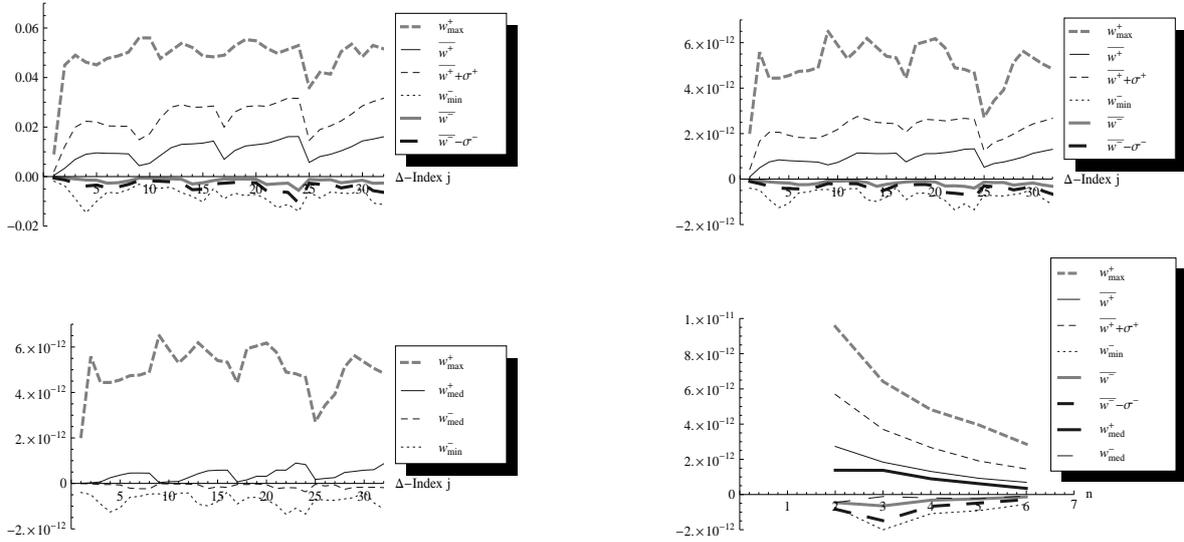


Abbildung 2.29: Bilder oben: Maximum, Mittelwert, Streuung der nichtnegativen Gewichte gegenüber Minimum, Mittelwert, Streuung der negativen Gewichte für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$ in Kappen mit Radius μ_0 (oben links), Radius μ_5 (oben rechts). Bild unten links: Median und Maximum der nichtnegativen Gewichte gegenüber Median und Minimum der negativen Gewichte für die Dreiecke $\Delta_{5,j}$ bei $n = 4$. Bild unten rechts: Darstellung von Maximum, Minimum usw. der Gewichte für die Polynomgrade $n = 2, 3, 4, 5, 6$ für das Dreieck $\Delta_{5,23}$.

Ob Quadraturformeln auf der Sphäre Spherical Harmonics bis zum Polynomgrad n exakt integrieren, können wir daher leicht testen. Dass wir die Werte der obigen Integrale kennen, wollen wir auch für unsere Quadratur über sphärische Dreiecke nutzen.

Unter der Triangulierung T der Sphäre verstehen wir eine Menge an Dreiecken $\{\Delta_j\}$ mit $\bigcup_{j=1}^{|T|} \Delta_j = \mathbb{S}^2$, wobei jedes Dreieck Δ_j eine Dreiecksseite bzw. ein Stück Dreiecksseite mit den anderen Dreiecken aus T teilen kann, es ansonsten aber keine Überlappungen gibt, d. h. die Schnittmenge zweier Dreiecke Δ_j und Δ_k , $j \neq k$, aus T ist entweder leer oder enthält ausschließlich Punkte einer gemeinsamen Kante oder enthält eine gemeinsame Ecke.

Für Polynomgrad n sind die Gauß-Gewichte $w_{n,j,1}, w_{n,j,2}, \dots, w_{n,j,4(n+2)(n+1)}$ und Gauß-Knoten $\mathbf{x}_{n,j,1}, \mathbf{x}_{n,j,2}, \dots, \mathbf{x}_{n,j,4(n+2)(n+1)}$ der Dreiecke Δ_j so konstruiert, dass

$$\int_{\Delta_j} Y_s(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_{n,j,k} Y_s(\mathbf{x}_{n,j,k}), \quad s = 0, 1, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, |T|.$$

Aus der Definition der Triangulierung T folgt

$$\sum_{j=1}^{|T|} \int_{\Delta_j} Y_s(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{S}^2} Y_s(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x}),$$

und damit erhalten wir

$$\sum_{j=1}^{|T|} \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_{n,j,k} Y_s(\mathbf{x}_{n,j,k}) = \begin{cases} \sqrt{4\pi}, & \text{falls } s = 0, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (2.61)$$

Mit den Gewichten $w_{n,j,1}, \dots, w_{n,j,4(n+2)(n+1)}$ und Knoten $\mathbf{x}_{n,j,1}, \dots, \mathbf{x}_{n,j,4(n+2)(n+1)}$, die der Mathematica-Code liefert, stellen wir die Vektoren

$$\mathbf{v}_{n,p} = \left(\sum_{j=1}^{|T|} \sum_{k=1}^{4(n+2)(n+1)} w_{n,j,k} Y_s(\mathbf{x}_{n,j,k}) \right)_{s=1}^{(p+1)^2}, \quad p = 0, 1, \dots, n,$$

auf und bestimmen die Fehler

$$E_{\{1,2,\infty\},n,p} = \frac{\|\mathbf{v}_{n,p} - \sqrt{4\pi}\mathbf{e}_{1,p}\|_{\{1,2,\infty\}}}{\|\sqrt{4\pi}\mathbf{e}_{1,p}\|_{\{1,2,\infty\}}},$$

wobei $\mathbf{e}_{1,p} := (1, 0, \dots, 0)^\top$ ein Vektor mit Länge $(p+1)^2$ ist und $\|\circ\|_2$ die euklidische Vektornorm, $\|\circ\|_1$ die L_1 -Norm und $\|\circ\|_\infty$ die Maximumnorm bezeichnet (siehe z. B. [31, S. 30]). Zusätzlich berechnen wir die Werte $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ auch für einige $p > n$. Wir erhoffen uns kleine Fehler für $p \leq n$ und erwarten, dass mit zunehmendem $p > n$ der Fehler wächst.

Für unsere Testrechnungen haben wir folgende Triangulierungen gewählt:

Triangulierung T_1 :

Ziemlich gleichmäßig über die Sphäre verteilte Punkte bilden die Ecken der sphärischen Dreiecke einer Delaunay-Triangulierung, die der Algorithmus aus [29] liefert. Mathematica kann die Gitterpunkte mit beliebiger Präzision bestimmen, wie auch die Summe über die Flächen der Dreiecke, $\sum_{j=1}^{|T|} F_j$, beliebig genau an den Wert der Sphärenfläche, 4π , heranreichen kann. Insgesamt liegen 212 sphärische Dreiecke vor, deren Dreiecksflächen Werte zwischen 0.049571 und 0.0754627 (siehe Abbildung 2.30) annehmen. Die

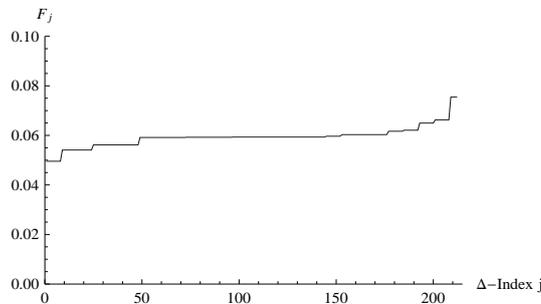


Abbildung 2.30: Dreiecksflächen F_j der Dreiecke der Triangulierung T_1 .

Darstellung der Fehler $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ der Triangulierung T_1 soll zeigen, dass wir mit den

ϵ -Parametern des Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16) die Fehler beeinflussen können.

Die Quadraturformeln über die Dreiecke der Triangulierung sind mit Parametern ϵ der Größe 10^{-30} oder 10^{-40} (je nach Dreieck) für Polynomgrad $n = 3$ berechnet worden. In einem zweiten Durchgang haben wir die Parameter auf ϵ^2 verringert. Für $p = 0, 1, 2, 3$ bewirkt die Änderung der ϵ -Werte eine Abnahme der Fehler $E_{\{1,2,\infty\},3,p}$ ca. um Faktor 10^{-29} . Bei $p = 4$ nehmen die Fehler in beiden Fällen dann deutlich ab und landen auf einem etwa gleichen Niveau ($-\log_{10} E_{2,3,4} \approx 6.4481$) (siehe Abbildung 2.31).

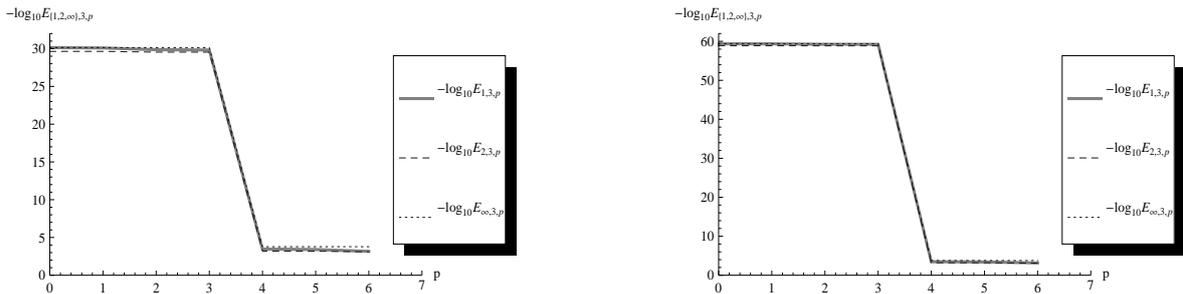


Abbildung 2.31: Fehlerwerte $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ der Gauß-Quadratur für Dreiecke der Triangulierung T_1 bei gegebenem Polynomgrad $n = 3$; **(Bild links:)** mit einfachen ϵ -Parametern; **(Bild rechts:)** mit Parametern ϵ^2 im Gautschi-Algorithmus.

Triangulierung T_2 :

Wir partitionieren die Sphäre mit dem Algorithmus aus [29] zunächst in größere sphärische Dreiecke, um dann die Flächen einiger dieser Dreiecke weiter in kleinere sphärische Unterdreiecke aufzuteilen. Alle Dreiecke zusammen bilden die Triangulierung T_2 der Sphäre. Die Triangulierung besteht aus vielen relativ kleinen und wenigen größeren Dreiecken (381 haben einen Flächeninhalt F_j mit $0.00198 < F_j < 0.005$, für 147 ist $0.005 < F_j < 0.02$ und für 45 ist $0.17 < F_j < 0.28$), insgesamt liegen 573 Dreiecke vor (siehe Abbildung 2.32). Das Partitionieren von Dreiecken in kleinere ist hier mit Genauigkeit 10^{-16} durchgeführt worden, d. h. $|\sum_{j=1}^{|T|} F_j - 4\pi|/(4\pi) \approx 10^{-16}$. Bei der Triangulie-

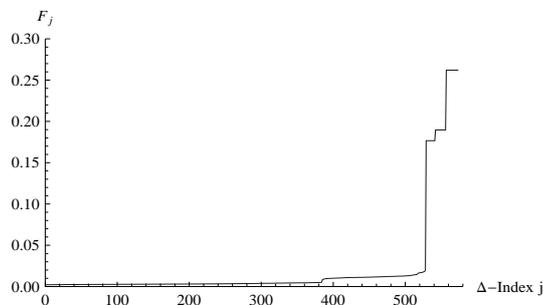


Abbildung 2.32: Dreiecksflächen F_j der Dreiecke der Triangulierung T_2 .

rung T_2 können die Werte $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ wegen des oben erwähnten Triangulierungsfehlers nicht kleiner als 10^{-16} sein. Für $n = 2$ und $n = 3$ stellen wir sie als $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$

in Abbildung 2.33 graphisch dar. Von $p = 0$ bis $p = n$ nehmen die Werte bis auf etwa 14.2156 ($\approx -\log_{10} E_{2,2,2}$) bzw. 14.0511 ($\approx -\log_{10} E_{2,3,3}$) bei $p = n$ leicht ab, um dann bei $p = n + 1$ stark abzufallen ($-\log_{10} E_{2,2,3} \approx 1.2280$, $-\log_{10} E_{2,3,4} \approx 0.9278$) und ab $p = n + 2$ weiter leicht abzunehmen.

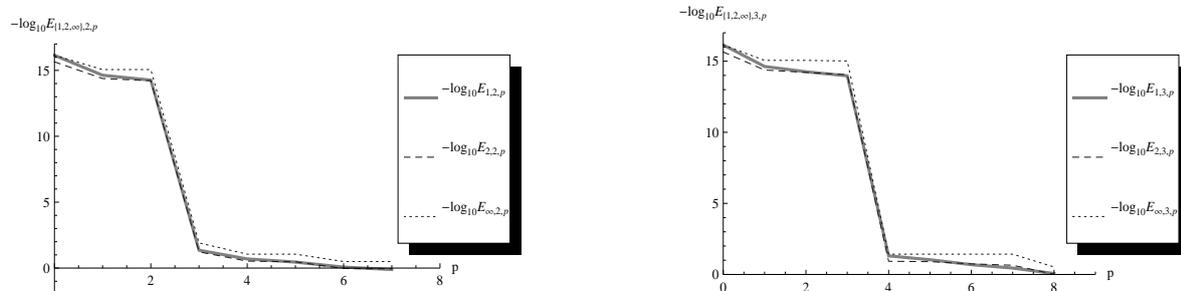


Abbildung 2.33: Fehlerwerte $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ der Gauß-Quadratur für Dreiecke der Triangulierung T_2 bei gegebenem Polynomgrad $n = 2$ (Bild links) und bei gegebenem Polynomgrad $n = 3$ (Bild rechts).

Kapitel 3

Quadraturformeln basierend auf beliebigen Knoten

Es sei $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ ein sphärisches Dreieck mit den Ecken $P_1, P_2, P_3 \in \mathbb{S}^2$. Die Ecken liegen auf der Grenze einer sphärischen Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(c(P_1, P_2, P_3))$, deren Zentrum $c(P_1, P_2, P_3)$ der Mittelpunkt des Umkreises des Dreiecks mit Radius $\mu = d(c(P_1, P_2, P_3), P_1)$ ist. Mit

$$\mathbf{y}_k, \quad k = 1, \dots, N,$$

seien beliebige Knoten gegeben, die Elemente des Dreiecks $\Delta(P_1, P_2, P_3)$, zumindest aber der Kappe $\mathbb{S}_\mu^2(c(P_1, P_2, P_3))$, seien. Wir suchen Quadraturgewichte λ_k , $k = 1, \dots, N$, so dass für alle Spherical Harmonics $P \in \mathbb{V}_n$ gilt

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k P(\mathbf{y}_k),$$

wobei die Anzahl N der Knoten und der Höchstgrad n die Bedingung $N > (n + 1)^2$ erfüllen.

In [24] beschreiben Mhaskar und Le Gia verschiedene Verfahren zur Berechnung der Quadraturgewichte λ_k für gegebene beliebige Knoten auf der gesamten Sphäre und allgemein für Teilgebiete der Sphäre. Wir wollen diese Verfahren speziell für sphärische Dreiecke untersuchen.

Satz 1 in [23] gibt Existenzbedingungen, die die Geometrie des sphärischen Dreiecks und die Verteilung der Knoten betreffen, an, unter denen Gewichte λ_k , $k = 1, \dots, N$, nichtnegativ sind. Testrechnungen zeigen, dass die Gewichte, die wir in den folgenden Kapiteln konstruieren, diesen Bedingungen folgen.

3.1 Konstruktion von Quadraturgewichten zu beliebigen Knoten

Wir definieren zunächst ein zum $L^2(\mathbb{S}^2)$ -Skalarprodukt analoges inneres Produkt für $\Delta(P_1, P_2, P_3)$.

Definition 3.1 Das $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$ -Skalarprodukt über das sphärische Dreieck $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ sei definiert als

$$\langle f, g \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} := \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} f(\mathbf{x}) \overline{g(\mathbf{x})} d\xi(\mathbf{x}) \quad \text{für } f, g \in L^2(\mathbb{S}^2).$$

Die Spherical Harmonics bilden eine Orthonormalbasis des \mathbb{V}_n bezüglich $\langle \circ, \circ \rangle_{L^2(\mathbb{S}^2)}$ (siehe Kapitel 1.1). Wir wollen eine Orthonormalbasis des \mathbb{V}_n bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$ bestimmen.

Ausgehend von den Basisfunktionen Y_l führen wir ein entsprechendes Orthonormalisierungsverfahren durch. Da wir für das Dreieck Gauß-Gewichte und -Knoten berechnen können, ist die Berechnung der $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$ -Skalarprodukte möglich. Das Orthonormalisierungsverfahren liefert Konstanten $a_{l,s}$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, $s = 1, 2, \dots, l$, so dass die Polynome

$$Z_l := \sum_{s=1}^l a_{l,s} Y_s, \quad l = 1, 2, \dots, (n+1)^2, \quad (3.1)$$

orthonormal bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$ sind und eine Orthonormalbasis des \mathbb{V}_n bezüglich $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$ bilden. Die Konstanten

$$a_{l,s} = \langle Z_l, Y_s \rangle_{L^2(\mathbb{S}^2)}, \quad s = 1, 2, \dots, l, \quad (3.2)$$

sind die Fourier-Koeffizienten von Z_l . Ist $F(\Delta(P_1, P_2, P_3))$ der Flächeninhalt des Dreiecks $\Delta(P_1, P_2, P_3)$, dann ist das Polynom Z_1 die Konstante

$$Z_1 = \frac{1}{\sqrt{F(\Delta(P_1, P_2, P_3))}}. \quad (3.3)$$

Es folgt die Definition eines weiteren Skalarproduktes.

Definition 3.2 Es seien beliebige Knoten $\mathbf{y}_k \in \mathbb{S}^2$, $k = 1, \dots, N$, gegeben. Sie seien Elemente der Menge $C = \{\mathbf{y}_k\}_{k=1}^N$.

Das Skalarprodukt $\langle \circ, \circ \rangle_C$ sei definiert als

$$\langle f, g \rangle_C := \sum_{k=1}^N w_k f(\mathbf{y}_k) \overline{g(\mathbf{y}_k)} \quad \text{für } f, g \in \mathbb{V}_n. \quad (3.4)$$

Die w_k , $k = 1, \dots, N$, seien positive, reellwertige Gewichte.

Die Gewichte w_k können beispielsweise als Voronoi-Gewichte oder äquidistant, z. B. als $w_k = 1/N$, gewählt werden.

Die Diagonalmatrix \mathbf{W} habe die positiven, reellwertigen Gewichte w_k aus (3.4), $k = 1, \dots, N$, als Einträge auf der Hauptdiagonalen, d. h.

$$\begin{aligned} (\mathbf{W})_{k,k} &= w_k, \\ (\mathbf{W})_{k,s} &= 0, \quad k \neq s. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Wir können bei gegebener geeigneter Menge C eine Orthonormalbasis des \mathbb{V}_n bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_C$ konstruieren.

Satz 3.3 *Wir nehmen an, dass die Knoten*

$$\mathbf{y}_k \in \mathbb{S}^2, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.6)$$

die die Menge $C = \{\mathbf{y}_k\}_{k=1}^N$ bilden, so gewählt seien, dass die Matrix \mathbf{G} ,

$$(\mathbf{G})_{l,k} := Z_l(\mathbf{y}_k), \quad l = 1, \dots, (n+1)^2, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.7)$$

mit den Polynomen Z_l aus (3.1) den Rang $(n+1)^2$ habe. Dann können wir Koeffizienten $c_{l,p} \in \mathbb{C}$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, $p = 1, 2, \dots, l-1$, $c_{l,l} \in \mathbb{R}$, $c_{l,l} > 0$, finden, so dass die Polynome

$$t_l := \sum_{p=1}^l c_{l,p} Z_p \quad (3.8)$$

orthonormal bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_C$ sind.

Beweis. Sei \mathbf{W} die Matrix aus (3.5). Die Matrix $\hat{\mathbf{G}} := \mathbf{G}\mathbf{W}\mathbf{G}^H$ ist unabhängig von der Wahl der Knoten \mathbf{y}_k hermitisch und positiv semidefinit, da

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^H \hat{\mathbf{G}} \mathbf{x} &= \sum_{j=1}^{(n+1)^2} \bar{x}_j \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \sum_{k=1}^N w_k Z_j(\mathbf{y}_k) \overline{Z_l(\mathbf{y}_k)} x_l \\ &= \sum_{k=1}^N w_k \left(\sum_{j=1}^{(n+1)^2} \bar{x}_j Z_j(\mathbf{y}_k) \right) \left(\sum_{l=1}^{(n+1)^2} x_l \overline{Z_l(\mathbf{y}_k)} \right) \\ &= \sum_{k=1}^N w_k \left| \sum_{j=1}^{(n+1)^2} x_j \overline{Z_j(\mathbf{y}_k)} \right|^2 \\ &= \sum_{k=1}^N w_k |(\mathbf{G}^H \mathbf{x})_k|^2 \geq 0. \end{aligned}$$

Hat die Matrix \mathbf{G} den Rang $(n+1)^2$, dann sind die Spalten der Matrix \mathbf{G}^H linear unabhängig. Daraus folgt, dass, falls \mathbf{x} gleich dem Nullvektor ist, $\mathbf{G}^H \mathbf{x}$ gleich dem Nullvektor und damit $\mathbf{x}^H \hat{\mathbf{G}} \mathbf{x}$ gleich Null ist. Andererseits ist $\mathbf{G}^H \mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ und daher $\mathbf{x}^H \hat{\mathbf{G}} \mathbf{x} \neq 0$, falls \mathbf{x} ungleich dem Nullvektor ist. Also ist die Matrix $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G}\mathbf{W}\mathbf{G}^H$ positiv definit und kann mit dem Cholesky-Verfahren in

$$\hat{\mathbf{G}} = \hat{\mathbf{D}}^H \hat{\mathbf{D}} \quad (3.9)$$

zerlegt werden, wobei $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2 \times (n+1)^2}$ eine obere Dreiecksmatrix mit positiven Diagonaleinträgen $(\hat{\mathbf{D}})_{l,l} > 0$ ist. Mit der unteren Dreiecksmatrix

$$\mathbf{D} := (\hat{\mathbf{D}}^H)^{-1} \quad (3.10)$$

ist $\mathbf{D}\hat{\mathbf{G}}\mathbf{D}^H = \mathbf{I}_{(n+1)^2}$, und für die Einträge dieser Matrix gilt

$$\sum_{p=1}^{(n+1)^2} (\mathbf{D})_{l,p} \sum_{j=1}^{(n+1)^2} \sum_{k=1}^N w_k Z_p(\mathbf{y}_k) \overline{Z_j(\mathbf{y}_k)} (\mathbf{D}^H)_{j,q} = \delta_{l,q},$$

$$l = 1, \dots, (n+1)^2, \quad q = 1, \dots, (n+1)^2.$$

Diese Gleichung ist äquivalent zu

$$\sum_{k=1}^N w_k \sum_{p=1}^{(n+1)^2} (\mathbf{D})_{l,p} Z_p(\mathbf{y}_k) \sum_{j=1}^{(n+1)^2} \overline{(\mathbf{D})_{q,j} Z_j(\mathbf{y}_k)} = \delta_{l,q}.$$

Mit den Koeffizienten

$$c_{l,p} := (\mathbf{D})_{l,p}, \quad l = 1, \dots, (n+1)^2, \quad p = 1, \dots, (n+1)^2,$$

wobei $c_{l,p} = 0$ für alle $p > l$ gilt, erfüllen die Polynome

$$t_l = \sum_{p=1}^{(n+1)^2} c_{l,p} Z_p, \quad l = 1, \dots, (n+1)^2,$$

die Gleichung

$$\sum_{k=1}^N w_k t_l(\mathbf{y}_k) \overline{t_q(\mathbf{y}_k)} = \delta_{l,q},$$

sind also orthonormal bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_C$. ■

Die Polynome t_l , $l = 1, \dots, (n+1)^2$, bilden eine Orthonormalbasis des \mathbb{V}_n bezüglich des Skalarproduktes $\langle \circ, \circ \rangle_C$, falls die Elemente der Menge C die Voraussetzung des obigen Satzes erfüllen. Es gilt die folgende Fourier-Darstellung:

Lemma 3.4 *Ein beliebiges Spherical Harmonic $P \in \mathbb{V}_n$ lässt sich als*

$$P(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \langle P, t_l \rangle_C t_l(\mathbf{x}) = \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \left(\sum_{k=1}^N w_k P(\mathbf{y}_k) \overline{t_l(\mathbf{y}_k)} \right) t_l(\mathbf{x})$$

mit den Basisfunktionen t_l , $l = 1, \dots, (n+1)^2$, aus (3.8) darstellen, falls die Knoten \mathbf{y}_k , $k = 1, 2, \dots, N$, die Voraussetzung aus Satz 3.3 erfüllen.

Der nächste Satz zeigt, wie wir zu den gegebenen Knoten \mathbf{y}_k Quadraturgewichte bestimmen können.

Satz 3.5 Es seien die Menge $C = \{\mathbf{y}_k\}_{k=1}^N$ aus (3.6), deren Knoten die Voraussetzung des Satzes 3.3 erfüllen, die Gewichte w_k , $k = 1, \dots, N$, aus (3.4), die Basisfunktionen t_l , $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, orthonormal bezüglich $\langle \circ, \circ \rangle_C$, mit den Koeffizienten $c_{l,k}$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, $k = 1, 2, \dots, l$, aus (3.8) und die Basisfunktionen Z_l , $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, orthonormal bezüglich $\langle \circ, \circ \rangle_{\Delta(P_1, P_2, P_3)}$, aus (3.1) gegeben.

Für jedes Polynom $P \in \mathbb{V}_n$ gilt dann die Quadraturformel

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N \lambda_k P(\mathbf{y}_k)$$

mit den Gewichten

$$\lambda_k := \frac{w_k}{Z_1} \sum_{l=1}^{(n+1)^2} c_{l,1} \overline{t_l(\mathbf{y}_k)}. \quad (3.11)$$

Beweis. Aus der Aussage des Lemmas 3.4 folgt

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \langle P, t_l \rangle_C t_l(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \langle P, t_l \rangle_C \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} t_l(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Das Skalarprodukt schreiben wir als Summe aus (3.4), vertauschen die Summation und erhalten

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^N w_k P(\mathbf{y}_k) \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \overline{t_l(\mathbf{y}_k)} \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} t_l(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Die Polynome t_l stellen wir wie in (3.8) als Linearkombination der Basisfunktionen Z_l dar und vertauschen Summation und Integration, d. h.

$$\begin{aligned} & \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) \\ &= \sum_{k=1}^N w_k P(\mathbf{y}_k) \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \overline{t_l(\mathbf{y}_k)} \sum_{p=1}^{(n+1)^2} c_{l,p} \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} 1 \cdot Z_p(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Wir multiplizieren den Integranden mit Eins, die sich mit der Konstanten Z_1 aus (3.3) zu Z_1/Z_1 erweitern lässt. Aus der Orthonormalitätseigenschaft der Z_l folgt

$$\int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} P(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x})$$

$$= \sum_{k=1}^N w_k P(\mathbf{y}_k) \sum_{l=1}^{(n+1)^2} \overline{t_l(\mathbf{y}_k)} \frac{1}{Z_1} c_{l,1}.$$

Also liegt hiermit eine Quadraturformel mit den Gewichten

$$\lambda_k = \frac{w_k}{Z_1} \sum_{l=1}^{(n+1)^2} c_{l,1} \overline{t_l(\mathbf{y}_k)}$$

vor. ■

Im Folgenden wollen wir die Quadraturgewichte (3.11) als Matrix-Vektor-Produkt darstellen.

Definition 3.6 *Es seien die Basisfunktionen Z_s , $s = 1, \dots, (n+1)^2$, aus (3.1), die Knoten \mathbf{y}_k , $k = 1, \dots, N$, aus (3.6), die die Voraussetzung aus Satz 3.3 erfüllen, die Basisfunktionen t_l , $l = 1, \dots, (n+1)^2$, mit den Koeffizienten $c_{l,p}$ aus (3.8) und die Gewichte λ_k aus (3.11) gegeben.*

Wir definieren den Vektor $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{C}^N$, die Matrix $\mathbf{T} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2 \times N}$ und den Vektor $\mathbf{c} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2}$ als

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{\lambda})_k &:= \lambda_k, & k = 1, \dots, N, \\ (\mathbf{T})_{l,k} &:= t_l(\mathbf{y}_k) = \sum_{p=1}^{(n+1)^2} c_{l,p} Z_p(\mathbf{y}_k), & l = 1, \dots, (n+1)^2, \end{aligned} \quad (3.12)$$

$$(\mathbf{c})_l := c_{l,1}. \quad (3.13)$$

Bemerkung 3.7 *Die Gewichte in (3.11) lassen sich also als das Matrix-Vektor-Produkt*

$$\boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{Z_1} \mathbf{W} \mathbf{T}^H \mathbf{c} \quad (3.14)$$

ausdrücken. Dabei ist \mathbf{W} die Diagonalmatrix aus (3.5).

Die Matrix $\mathbf{G} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2 \times N}$ aus (3.7), die untere Dreiecksmatrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2 \times (n+1)^2}$ aus (3.10) und die obere Dreiecksmatrix $\hat{\mathbf{D}} \in \mathbb{C}^{(n+1)^2 \times (n+1)^2}$ aus (3.9) haben die Einträge

$$(\mathbf{G})_{s,k} = Z_s(\mathbf{y}_k),$$

und

$$(\mathbf{D})_{l,p} = c_{l,p}, \quad \hat{\mathbf{D}} = (\mathbf{D}^H)^{-1}. \quad (3.15)$$

Die Matrix \mathbf{T} aus (3.12) können wir dann als das Produkt

$$\mathbf{T} = \mathbf{D} \mathbf{G} \quad (3.16)$$

darstellen.

3.2 Kleinste-Quadrate-Verfahren

Wir wollen in diesem Abschnitt zeigen, dass der Gewichtsvektor $\boldsymbol{\lambda}$ als Lösung eines Kleinste-Quadrate-Problems aufgefasst werden kann. Dazu sehen wir uns zunächst den folgenden bekannten Zusammenhang aus [2, S. 5–8] an.

Satz 3.8 *Es sei $\mathbf{F} \in \mathbb{C}^{M \times N}$ eine Matrix mit Rang M , \mathbf{W} eine Diagonalmatrix mit den Diagonalelementen $w_k > 0$, $k = 1, 2, \dots, N$, und $\mathbf{W}^{1/2}$ eine Diagonalmatrix mit den Elementen $\sqrt{w_k}$.*

Die eindeutige Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{C}^n} \|\mathbf{W}^{-1/2} \boldsymbol{\alpha}\|_2^2, \quad \mathbf{F} \boldsymbol{\alpha} = \hat{\mathbf{d}} \in \mathbb{C}^M \quad (3.17)$$

genügt der Normalengleichung zweiter Art

$$\mathbf{F} \mathbf{W} \mathbf{F}^H \mathbf{z} = \hat{\mathbf{d}}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{W} \mathbf{F}^H \mathbf{z}.$$

Beweis. Die Räume $\mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$ und $\mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H)$ seien definiert als

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2}) &:= \{\mathbf{y} \in \mathbb{C}^N : \mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{y} = \mathbf{0}\}, \\ \mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H) &:= \{\mathbf{d} \in \mathbb{C}^M : \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H \mathbf{x} = \mathbf{d}, \mathbf{x} \in \mathbb{C}^M\}. \end{aligned}$$

Dabei ist $\mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H)$ das orthogonale Komplement zu $\mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$ in \mathbb{C} , denn für beliebige Elemente $\mathbf{y} \in \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$ und $\mathbf{d} \in \mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H)$ ist das Skalarprodukt

$$\langle \mathbf{d}, \mathbf{y} \rangle_2 = \langle \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_2 = \mathbf{y}^H \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H \mathbf{x} = (\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{y})^H \mathbf{x} = 0.$$

Der Lösungsraum des linearen Gleichungssystems $\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{y} = \hat{\mathbf{d}}$ ist der Raum $\hat{\mathbf{x}} + \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$, wobei $\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{d}}$ gilt. Sei $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}} + \mathbf{z}_0$, $\mathbf{z}_0 \in \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$, eine beliebige Lösung. Dann ist

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = \|\hat{\mathbf{x}} + \mathbf{z}_0\|_2^2 = \|\hat{\mathbf{x}}\|_2^2 + \|\mathbf{z}_0\|_2^2 + \hat{\mathbf{x}}^H \mathbf{z}_0 + \mathbf{z}_0^H \hat{\mathbf{x}}.$$

Gilt $\hat{\mathbf{x}} \perp \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$, dann ist $\|\mathbf{x}\|_2^2 = \|\hat{\mathbf{x}}\|_2^2 + \|\mathbf{z}_0\|_2^2$, und dieser Ausdruck nimmt einen minimalen Wert an, falls \mathbf{z}_0 die Nulllösung des homogenen Gleichungssystems $\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{y} = \mathbf{0}$ ist. Also ist für $\mathbf{x} = \hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{x}} \perp \mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$, der Wert der Norm $\|\mathbf{x}\|_2^2$ minimal. Da der Raum $\mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H)$ das orthogonale Komplement zu $\mathcal{N}(\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2})$ darstellt, ist $\hat{\mathbf{x}}$ Element aus $\mathcal{R}(\mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H)$, d. h. es existiert ein $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^M$, so dass $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H \mathbf{z}$, und \mathbf{z} erfüllt die Gleichung

$$\mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{F} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{W}^{1/2} \mathbf{F}^H \mathbf{z} = \mathbf{F} \mathbf{W} \mathbf{F}^H \mathbf{z} = \hat{\mathbf{d}}.$$

Es sei $\boldsymbol{\alpha} := \mathbf{W}^{1/2} \hat{\mathbf{x}}$. Dies ist die Lösung des Gleichungssystems $\mathbf{F} \boldsymbol{\alpha} = \hat{\mathbf{d}}$, bei der der Wert $\|\mathbf{W}^{-1/2} \boldsymbol{\alpha}\|_2^2 = \|\hat{\mathbf{x}}\|_2^2$ minimal ist. Die Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems (3.17) genügt der Normalengleichung zweiter Art $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{W}^{1/2} \hat{\mathbf{x}} = \mathbf{W} \mathbf{F}^H \mathbf{z}$, $\mathbf{F} \mathbf{W} \mathbf{F}^H \mathbf{z} = \hat{\mathbf{d}}$. ■

Satz 3.9 Es seien die Diagonalmatrix \mathbf{W} aus (3.5), die Matrix \mathbf{G} aus (3.7) und die Basisfunktionen Z_l , $l = 1, \dots, (n+1)^2$, aus (3.1) gegeben. Der Vektor \mathbf{b} habe die Einträge

$$(\mathbf{b})_l := \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} Z_l(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1/Z_1, & \text{falls } j = 1, \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases} \quad (3.18)$$

Die eindeutig bestimmte Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{C}^N} \|\mathbf{W}^{-1/2} \boldsymbol{\alpha}\|_2^2, \quad \mathbf{G} \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{b}$$

ist der Vektor $\boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{Z_1} \mathbf{W} \mathbf{T}^H \mathbf{c}$ (vergleiche (3.14)), wobei \mathbf{T} in (3.12) gegeben ist.

Beweis. Es sei $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ die Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems. Mit Satz 3.8 wissen wir dann, dass $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ die Normalengleichung zweiter Art erfüllt, d. h. für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ gilt

$$\mathbf{G} \mathbf{W} \mathbf{G}^H \mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{W} \mathbf{G}^H \mathbf{x} = \hat{\boldsymbol{\alpha}}.$$

Wie wir im Beweis zu Satz 3.3 gezeigt haben, ist die Matrix $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G} \mathbf{W} \mathbf{G}^H$ positiv definit und lässt sich in das Produkt $\hat{\mathbf{G}} = \hat{\mathbf{D}}^H \hat{\mathbf{D}}$ aus (3.9) zerlegen. Mit der Matrix \mathbf{D} aus (3.10) ist dann

$$\mathbf{x} = \hat{\mathbf{D}}^{-1} (\hat{\mathbf{D}}^H)^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{D}^H \mathbf{D} \mathbf{b}.$$

Damit erhalten wir unter Berücksichtigung von Gleichung (3.16) und der Tatsache, dass der Vektor \mathbf{c} der ersten Spalte der Matrix \mathbf{D} entspricht (siehe (3.13) und (3.15)), also $\mathbf{D} \mathbf{b} = 1/Z_1 \mathbf{c}$ ist, die Lösung

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\alpha}} &= \mathbf{W} \mathbf{G}^H \mathbf{D}^H \mathbf{D} \mathbf{b} \\ &= \mathbf{W} \mathbf{T}^H \frac{1}{Z_1} \mathbf{c}. \end{aligned}$$

Die Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems ist gleich dem Vektor $\boldsymbol{\lambda}$ aus (3.14). ■

Es sei

$$\begin{aligned} (\mathbf{Y})_{l,k} &:= Y_l(\mathbf{y}_k), \quad l = 1, \dots, (n+1)^2, \quad k = 1, \dots, N, \\ (\hat{\mathbf{b}})_l &:= \int_{\Delta(P_1, P_2, P_3)} Y_l(\mathbf{x}) \, d\xi(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (3.19)$$

Das Orthonormalisierungsverfahren zur Bestimmung der Polynome Z_l , $l = 1, \dots, (n+1)^2$, aus (3.1), ausgehend von den Basisfunktionen Y_l , liefert die Koeffizienten $a_{l,s}$, $s = 1, \dots, (n+1)^2$, aus (3.2), wobei $a_{l,s} = 0$ für alle $l < s$ und $a_{l,l} > 0$ sind, so dass

$$Z_l = \sum_{s=1}^l a_{l,s} Y_s$$

gilt. Es sei \mathbf{A} eine untere Dreiecksmatrix mit den Einträgen

$$(\mathbf{A})_{l,s} := a_{l,s}. \quad (3.20)$$

Nun können wir \mathbf{G} aus (3.7) und \mathbf{b} aus (3.18) als $\mathbf{G} = \mathbf{A}\mathbf{Y}$ und $\mathbf{b} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{b}}$ schreiben, und es gilt, dass $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^N$ genau dann Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\mathbf{Y}\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$$

ist, falls

$$\mathbf{A}\mathbf{Y}\mathbf{x} = \mathbf{A}\hat{\mathbf{b}}.$$

Korollar 3.10 Die eindeutig bestimmte Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems

$$\min_{\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{C}^N} \|\mathbf{W}^{-1/2}\boldsymbol{\alpha}\|_2^2, \quad \mathbf{Y}\boldsymbol{\alpha} = \hat{\mathbf{b}}$$

ist der Vektor $\boldsymbol{\lambda} = \frac{1}{Z_1}\mathbf{W}\mathbf{T}^H\mathbf{c}$ (vergleiche (3.14)).

3.3 Zusammenfassung

Aus den letzten Kapiteln kristallisieren sich nun verschiedene Verfahren heraus, zu geeigneten beliebigen Knotenmengen C die Quadraturgewichte aus (3.14) zu bestimmen. In diesem Abschnitt stellen wir die einzelnen Berechnungsschritte zweier möglicher Algorithmen zusammenfassend dar. Dabei beschränken wir uns auf Verfahren, bei denen die Cholesky-Zerlegung eine Rolle spielt. Iterative Verfahren zur Lösung des Kleinste-Quadrate-Problems berücksichtigen wir hier nicht. Mhaskar und Le Gia schlagen in [24] ein rekursives Verfahren vor, um z. B. die Möglichkeit zu haben, mit großen Knotenmengen, trotz begrenzten Speicherplatzes, umgehen zu können. Durch eine Partitionierung der Sphäre in sphärische Dreiecke und Aufteilung einer großen Knotenmenge in kleinere Untermengen auf die Dreiecke verfolgen wir hier eine alternative Strategie.

Der Algorithmus I bestimmt in den ersten Schritten die Basisfunktionen Z_l aus (3.1). Die Berechnung erfolgt über die Gram-Matrix $\hat{\mathbf{U}}$, u. a. mit Hilfe der Cholesky-Zerlegung erhalten wir die Matrix \mathbf{A} aus (3.20). Dieses Vorgehen ist stabiler als eine rekursive Berechnung der Basisfunktionen. Danach folgt der Algorithmus den Beweisschritten zu Satz 3.3.

Algorithmus I

Eingabe: Polynomgrad n , beliebige Knoten \mathbf{y}_k , $k = 1, 2, \dots, N$, Matrix \mathbf{W} aus (3.5).

Vorbereitung: Gauß-Quadraturformel mit den Gewichten $\mathbf{w}^{(2n,\mu,\alpha,\beta)}$ und den Knoten $\mathbf{x}^{(2n,\mu)}$.

1. Aufstellen der Matrix $(\mathbf{U})_{l,j} = Y_l((\mathbf{x}^{(2n,\mu)})_j)$, $l = 1, 2, \dots, (2n+1)^2$, $j = 1, 2, \dots, 4(2n+2)(2n+1)$.
2. Berechnung der Gram-Matrix $\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{U} \text{diag}(\mathbf{w}^{(2n,\mu,\alpha,\beta)}) \mathbf{U}^H$.
3. Cholesky-Zerlegung liefert $\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{A}}^H \hat{\mathbf{A}}$.
4. Bestimmung der Inversen $\mathbf{A} = (\hat{\mathbf{A}}^H)^{-1}$.
5. Aufstellen der Matrix $(\mathbf{Y})_{l,k} = Y_l(\mathbf{y}_k)$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, $k = 1, 2, \dots, N$.
6. Berechnung der Matrizen $\mathbf{G} = \mathbf{A}\mathbf{Y}$, $\hat{\mathbf{G}} = \mathbf{G}\mathbf{W}\mathbf{G}^H$.
7. Mit Cholesky-Verfahren erhalten wir $\hat{\mathbf{G}} = \hat{\mathbf{D}}^H \hat{\mathbf{D}}$.
8. Bestimmung der Inversen $\mathbf{D} = (\hat{\mathbf{D}}^H)^{-1}$ und der Matrix $\mathbf{T} = \mathbf{D}\mathbf{G}$.
9. Berechnung der Quadraturgewichte $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{W}\mathbf{G}^H \mathbf{D}^H \mathbf{D} \mathbf{b} = \frac{1}{Z_1} \mathbf{W}\mathbf{T}^H \mathbf{c}$.

Algorithmus II löst das Kleinste-Quadrate-Problem aus Korollar 3.10 mit der Normalgleichung zweiter Art,

$$\mathbf{Y}\mathbf{W}\mathbf{Y}^H \mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}, \quad \mathbf{W}\mathbf{Y}^H \mathbf{x} = \boldsymbol{\lambda}.$$

Die Integrale aus (3.19) berechnen wir mit Gauß-Gewichten $\mathbf{w}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ und -Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu)}$.

Algorithmus II

Eingabe: Polynomgrad n , beliebige Knoten \mathbf{y}_k , $k = 1, 2, \dots, N$, Matrix \mathbf{W} aus (3.5).

Vorbereitung: Gauß-Quadraturformel mit den Gewichten $\mathbf{w}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ und den Knoten $\mathbf{x}^{(n,\mu)}$

1. Aufstellen des Vektors $\hat{\mathbf{b}} = \mathbf{Y}^{(n,\mu)} \mathbf{w}^{(n,\mu,\alpha,\beta)}$ mit der Matrix $(\mathbf{Y}^{(n,\mu)})_{l,j} = Y_l((\mathbf{x}^{(n,\mu)})_j)$, $l = 1, \dots, (n+1)^2$, $j = 1, \dots, 4(n+2)(n+1)$.
2. Aufstellen der Matrix $(\mathbf{Y})_{l,k} = Y_l(\mathbf{y}_k)$, $l = 1, 2, \dots, (n+1)^2$, $k = 1, 2, \dots, N$.
3. Matrizenmultiplikation $\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{Y}\mathbf{W}\mathbf{Y}^H$.
4. Mit Cholesky-Verfahren erhalten wir $\hat{\mathbf{Y}} = \hat{\mathbf{L}}^H \hat{\mathbf{L}}$.
5. Bestimmung der Inversen $\mathbf{L} = (\hat{\mathbf{L}}^H)^{-1}$.
6. Berechnung der Quadraturgewichte $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{W}\mathbf{Y}^H \mathbf{L}^H \hat{\mathbf{L}} \hat{\mathbf{b}}$.

3.4 Testrechnungen

An den Testdreiecken $\Delta_{r,j}$, $j = 1, 2, \dots, 32$, aus Kapitel 2.5.1, in sphärischen Kappen $\mathbb{S}_{\mu_r}^2(X_0)$ mit den Radien $\mu_r = 10^{-r}$, $r = 0, 3, 5$, gelegen, haben wir die Gauß-Quadraturformel im Kapitel 2.5 untersucht, an ihnen haben wir auch die Algorithmen I und II getestet. Bei der Dokumentation der Testergebnisse werden wir den Algorithmus I vernachlässigen, da er sich in puncto Berechnungszeit und Stabilität dem Algorithmus II unterlegen gezeigt hat. Wir wählen die N beliebigen Knoten, zu denen wir Quadraturgewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ für Polynomgrad n berechnen wollen, als Untermengen $C_{r,j,N} = \{\mathbf{y}_{r,j,k}\}_{k=1}^N$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$, und zwar so, dass die Knoten möglichst gleichmäßig über die Dreiecksflächen verteilt sind. Die Knoten in den Dreiecken liefert der Algorithmus aus [1], der gleichförmig verteilte Zufallspunkte in beliebigen sphärischen Dreiecken generiert. Wir nutzen dabei die Möglichkeit, sogenannte stratifizierte Knoten zu erhalten, die in ihrem Abstand zueinander minimal streuen. Als Diagonalmatrix \mathbf{W}_N wählen wir diejenige mit den Einträgen $w_1 = w_2 = \dots = w_N = 1/N$. Natürlich können auch andere Gewichte w_j verwendet werden, z. B. Voronoi-Gewichte. Erste Untersuchungen haben aber bei unseren gewählten Knoten keine bemerkenswerten Unterschiede, was z. B. die Anzahl der negativen Quadraturgewichte oder die Werte der Summe $1/F_{r,j} \sum_{k=1}^N |\lambda_{n,r,j,N,k}|$ betrifft, zwischen Voronoi- und äquidistanten Gewichten gezeigt.

Unsere Tests haben wir, wie schon im Kapitel 2.5, auf einem AMD Athlon(tm) 64 Prozessor 3000+ – 2009.75 MHz – CPU-System mit 997.5 MB RAM, SUSE-Linux (kernel 2.6.27.7-9-pae i686) mit Mathematica 7 durchgeführt. Die Mathematica-Funktionen AbsoluteTiming und Precision haben uns dabei Berechnungszeiten und Präzision geliefert.

Um die Vektoren $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ der Länge $(n+1)^2$ im ersten Schritt des Algorithmus II aufstellen zu können, müssen zunächst die Gauß-Quadraturgewichte und -knoten für Polynomgrad n bestimmt werden. Bei unseren ersten Berechnungen haben wir Mathematica die Zeiten und Präzisionen für die Gauß-Quadratur und die Schritte eins bis sechs des Algorithmus II für Knotenzahlen $N = 100, 196, 298$ jeweils für Polynomgrade $n = 2, 3, 4, 5, 6$ ausgeben lassen. In weiteren Testrechnungen haben wir die Einträge der Vektoren $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ für Polynomgrad $n = 6$ bestimmt und erhalten durchschnittliche Berechnungszeiten der Schritte zwei bis sechs und durchschnittliche Präzisionswerte der einzelnen Zwischenergebnisse und Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ über je fünf Knotenmengen $C_{r,j,N}$ mit $N = 100, 196, 289, 324, 400, 625, 900, 1225, 1600$ für die Polynomgrade $n = 2, 3, 4, 5, 6$. Die zusätzlich berechneten Maxima der nichtnegativen Gewichte, $\lambda_{\max,n,r,j,N}^+$, die Minima der negativen Gewichte, $\lambda_{\min,n,r,j,N}^-$, die Mittelwerte der nichtnegativen und negativen Gewichte, $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^-$, und die Standardabweichungen der nichtnegativen und negativen Gewichte, $\sigma_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\sigma_{n,r,j,N}^-$, sollen ebenfalls als Durchschnittswerte über fünf Knotenmengen verstanden werden.

3.4.1 Berechnungszeiten

Den Zeiten $t_{\text{Gauß}}$ für die Gauß-Quadratur stellen wir die Gesamtberechnungszeiten t_{ges} (Gauß-Quadratur und Algorithmus II) in Abbildung 3.1 gegenüber. Während die Zeiten der Gauß-Quadratur von der Geometrie des jeweiligen Dreiecks abhängen, werden die

Berechnungszeiten des Algorithmus II von der Art der Dreiecke nicht bemerkenswert beeinflusst, die entsprechenden Kurven für $t_{\text{Gauß}}$ und t_{ges} verlaufen parallel zueinander.

Im ersten Schritt des Algorithmus werden die Spherical Harmonics an den Gauß-Knoten mit der Mathematica-internen Funktion `SphericalHarmonicY` ausgewertet.

Für die anschließende Berechnung der Einträge des Vektors $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ benötigen wir $O(n^4)$ Additionen und Multiplikationen. Das Aufstellen der Matrix $\mathbf{Y}_{n,r,j,N}$ erfolgt mit Hilfe der Mathematica-Funktion `SphericalHarmonicY`. Die Matrizenmultiplikation im dritten Schritt benötigt $O(Nn^4)$ Multiplikationen und Additionen. In der Literatur (siehe z. B. [33, S. 209]) finden wir für die Komplexität der Cholesky-Zerlegung die Abschätzung von $n^3/6$ Additionen und Multiplikationen und n Wurzeloperationen. Für die Bestimmung der Inversen der unteren Dreiecksmatrix $\mathbf{L}_{n,r,j,N}$ verwenden wir die Mathematica-interne Funktion `Inverse`, sie kann auf jeden Fall mit $O(n^3)$ Additionen und Multiplikationen berechnet werden. Der letzte Schritt des Algorithmus benötigt $O(Nn^4)$ Additionen und Multiplikationen. Wir erwarten also, dass die Berechnungszeiten schnell mit dem Polynomgrad n wachsen, während zwischen der Zeit und N vermutlich eine lineare Abhängigkeit besteht. Berechnungen für das Dreiecke $\Delta_{5,13}$ für Knotenmengen mit $N = 100, 196, 289$ und die Polynomgrade $n = 2, 3, 4, 5, 6$ bestätigen dies (siehe Abbildung 3.2).

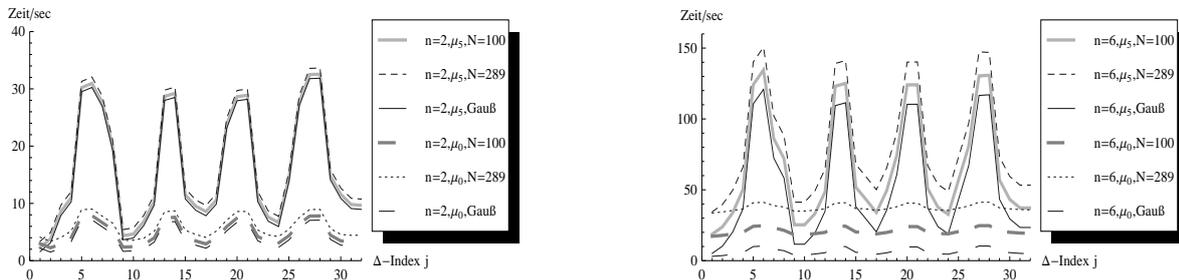


Abbildung 3.1: Gesamtrechnungszeit t_{ges} (Gauß und Algorithmus II) für die Berechnung der Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ zu Knotenmengen mit Knotenzahl $N = 100$ bzw. $N = 289$ und Zeiten $t_{\text{Gauß}}$ für die Bestimmung der Gauß-Quadratur für Dreiecke $\Delta_{r,j}$ mit Radien μ_r , $r = 0, 5$, für Polynomgrad $n = 2$ (linkes Bild) bzw. $n = 6$ (rechtes Bild).

3.4.2 Stabilität, Fehler

Die Gauß-Gewichte und -Knoten liegen mit Präzision 230 vor (mehr zur Präzision siehe Kapitel 2.3.3). Während der Vektor $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$, die Einträge der Matrix $\mathbf{Y}_{n,r,j,N}$ mit der Mathematica-internen Funktion `SphericalHarmonicY` und die Matrix $\mathbf{L}_{n,r,j,N}$ mit Hilfe des Mathematica-internen Cholesky-Verfahrens und der Mathematica-Funktion `Inverse` nahezu ohne Präzisionsverlust berechnet werden können, zeigt sich die erste Instabilität bei der Matrizenmultiplikation $\mathbf{W}_N \mathbf{Y}_{n,r,j,N}^H \mathbf{L}_{n,r,j,N}^H$. Weitere Präzisionsverluste ergeben sich, wenn die Matrix $\mathbf{W}_N \mathbf{Y}_{n,r,j,N}^H \mathbf{L}_{n,r,j,N}^H \mathbf{L}_{n,r,j,N}$ mit dem Vektor $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ zum Gewichtsvektor $\lambda_{n,r,j,N}$ multipliziert wird.

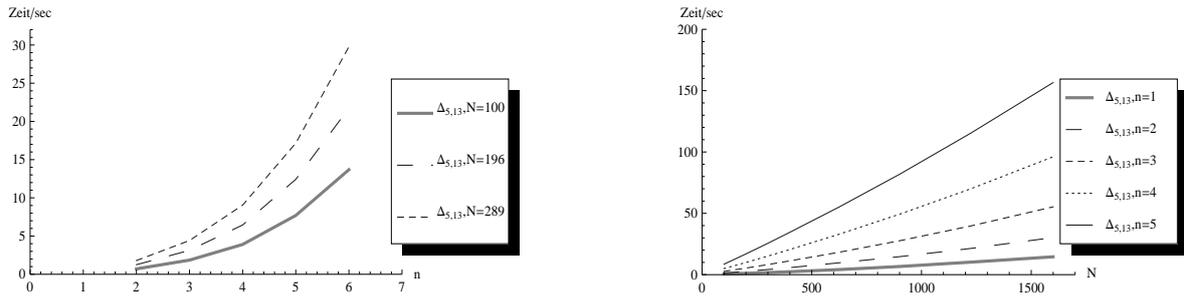


Abbildung 3.2: Linkes Bild: Berechnungszeiten der Gewichte $\lambda_{n,5,13,N}$ zu Knotenmengen mit Knotenanzahl $N = 100, 196, 289$ mit Algorithmus II (ohne Berechnung der Gauß-Gewichte und -Knoten) am Beispiel des Dreiecks $\Delta_{5,13}$. Rechtes Bild: Berechnungszeiten der Gewichte $\lambda_{n,5,13,N}$ zu Knotenmengen mit Knotenanzahl N mit Algorithmus II (Schritte zwei bis sechs) am Beispiel des Dreiecks $\Delta_{5,13}$.

Eine Änderung der Reihenfolge der Multiplikationen bringt keine größere Stabilität. Die Präzisionsverluste sind umso höher, je größer der Polynomgrad n oder je kleiner der Radius $\mu_r = 10^{-r}$, $r = 0, 3, 5$, ist, sie verhalten sich bezüglich n und r linear (siehe Abbildung 3.3).

In allen Testrechnungen erhalten wir reellwertige Gewichte. Ein großes Problem, was die Stabilität der Algorithmen I und II betrifft, ist, dass uns kein geschlossener Ausdruck für die Basisfunktionen Z_l aus (3.1) für unsere Dreiecke bekannt ist, sondern sie nur als Linearkombination der Spherical Harmonics Y_s darstellbar sind. Die Spherical Harmonics Y_s , als globale Basisfunktionen, sind aber über kleine sphärische Dreiecke nahezu konstant. Dies führt dazu, dass die Koeffizienten der Matrix \mathbf{A} aus (3.20) relativ große Absolutwerte aufweisen. Die Matrizenmultiplikation zum Gewichtsvektor, der vergleichsweise kleine reellwertige Einträge hat, kann so zu Auslöschungen von Stellen führen.

Wie vielen Stellen der Mantisse der einzelnen Gewichte wir vertrauen können, hängt davon ab, wie viele Ziffern des Vektors $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ korrekt gewesen sind. Wir berechnen den relativen Fehler

$$E_{2,n,r,j,N} = \frac{\|\lambda_{n,r,j,N} - \tilde{\lambda}_{n,r,j,N}\|_2}{\|\tilde{\lambda}_{n,r,j,N}\|_2},$$

wobei bei der Berechnung von $\lambda_{n,r,j,N}$ die Gauß-Quadratur, die wir für die Berechnung des Vektors $\hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}$ benötigen, mit den Parametern $\epsilon_{n,r,j}^{(1)}$, $\epsilon_{n,r,j}^{(2)}$, $\epsilon_{n,r,j}^{(3)}$ (vergleiche Kapitel 2.5.1) bestimmt wird, während bei der Berechnung von $\tilde{\lambda}_{n,r,j,N}$ die Parameter $(\epsilon_{n,r,j}^{(1)})^2$, $(\epsilon_{n,r,j}^{(2)})^2$, $(\epsilon_{n,r,j}^{(3)})^2$ gewählt worden sind. Die Werte der Fehler stellen wir am Beispiel von Polynomgrad $n = 4$ und Knotenzahl $N = 289$ in Abbildung 3.4 dar, sie sind kleiner als 10^{-21} .

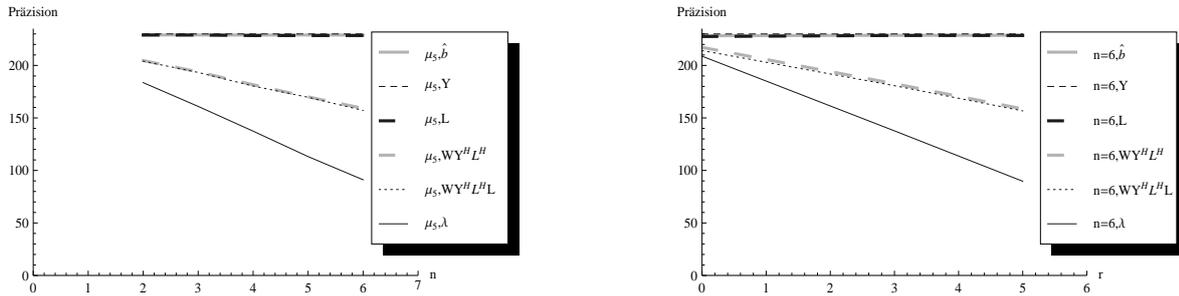


Abbildung 3.3: Präzision von Teilergebnissen des Algorithmus II; linkes Bild: am Beispiel des Dreiecks $\Delta_{5,13}$ für die Polynomgrade $n = 2, 3, \dots, 6$; rechtes Bild: für die Dreiecke $\Delta_{r,13}$, $r = 0, 3, 5$, bei gegebenem Polynomgrad $n = 6$.

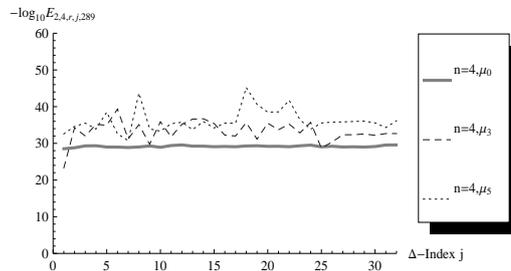


Abbildung 3.4: Fehler $-\log_{10} E_{2,n,r,j,N}$ der Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ zu einer Knotenmenge mit Knotenzahl $N = 100$ für Polynomgrad $n = 4$ dargestellt für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 3, 5$.

3.4.3 Bewertung der Quadraturformel

Für jede Knotenmenge $C_{r,j,N} = \{\mathbf{y}_{r,j,k}\}_{k=1}^N$ in unseren Testdreiecken bestimmen wir als Maß für die Dichte der Knoten zueinander die Distanz

$$\delta(C_{r,j,N}) = \min_{\mathbf{y}_{r,j,s} \in C_{r,j,N}} \min_{\mathbf{y}_{r,j,k} \in C_{r,j,N}} d(\mathbf{y}_{r,j,s}, \mathbf{y}_{r,j,k}), \quad s \neq k.$$

Wir teilen die Dreiecksfläche bezüglich der Knotenmenge in Voronoi-Gebiete $V_{r,j,k}$ auf, berechnen die jeweils größte Distanz zwischen zwei Elementen \mathbf{x} und \mathbf{y} eines jeden Voronoi-Gebietes $V_{r,j,k}$ und definieren schließlich die Distanz

$$\delta(C_{r,j,N}, \Delta_{r,j}) := \max_{k=1, \dots, N} \max_{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V_{r,j,k}} d(\mathbf{x}, \mathbf{y}),$$

die vermittelt, wie die Menge $C_{r,j,N}$ bezüglich der Elemente des Dreiecks $\Delta_{r,j}$ verteilt ist.

Wie zu erwarten sinken die Werte $\delta(C_{r,j,N})$ und $\delta(C_{r,j,N}, \Delta_{r,j})$, wenn die Knotenzahl N steigt, und zwar mit zunehmender Zahl N immer langsamer (siehe Abbildung 3.5). Betrachten wir die Anzahl $N_{n,r,j,N}^-$ der negativen Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}^-$, so beobachten wir hier ein ähnliches Wachstumsverhalten, beispielhaft für die Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 0, 5$, $j = 13$, bei Polynomgrad $n = 6$ in Abbildung 3.6 gezeigt. In Abbildung 3.6 finden wir auch Plots von den Werten $S_{n,r,13,N}/F_{r,13}$, wobei $S_{n,r,13,N} = \sum_{k=1}^N |\lambda_{n,r,13,N,k}|$ ist, für die Dreiecke $\Delta_{r,13}$ bei Polynomgrad $n = 6$ und Knotenzahl N . Bei kleineren Knotenzahlen gibt

es große Differenzen zwischen $S_{n,r,13,N}/F_{r,13}$ und Eins, mit wachsendem N nähert sich $S_{n,r,13,N}/F_{r,13}$ aber schnell der Eins. Wählen wir die feste Knotenzahl $N = 100$ und lassen den Polynomgrad wachsen, dann nimmt die Anzahl der negativen Gewichte $N_{n,r,13,100}^-$ ab Polynomgrad $n = 4$ (bei $n = 2$ und $n = 3$ sind alle Gewichte nichtnegativ) rasch zu. Analog dazu wachsen auch die Quotienten $S_{n,r,13,100}/F_{r,13}$. Bei $n = 4$ liegen negative Gewichte vor, die Werte $S_{n,r,13,100}/F_{r,13}$ sind nahezu Eins.

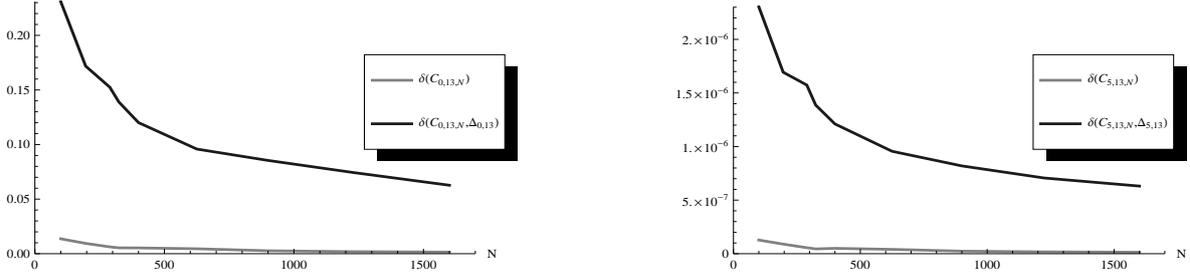


Abbildung 3.5: Darstellung der Distanzen $\delta(C_{r,13,N})$ und $\delta(C_{r,13,N}, \Delta_{r,j})$ der Knotenmengen $C_{r,13,N}$ der Dreiecke $\Delta_{r,13}$, $r = 0, 5$.

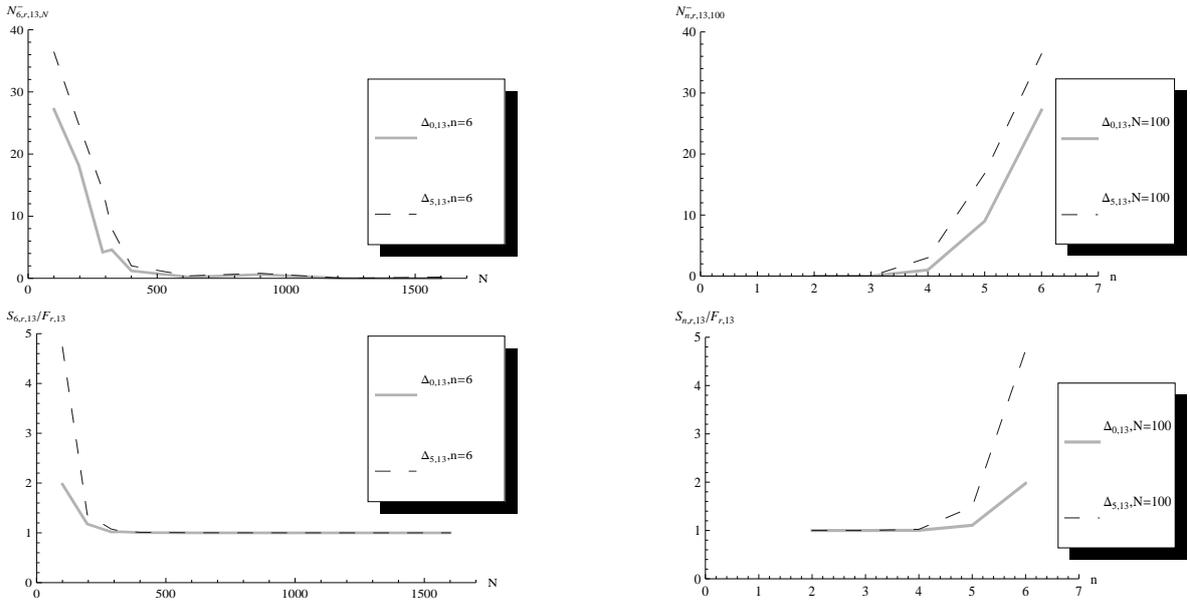


Abbildung 3.6: Anzahl $N_{n,r,13,N}^-$ der negativen Gewichte $\lambda_{n,r,13,N}^-$ und die Summe $S_{n,r,13}/F_{r,13}$ der Gewichte $\lambda_{n,r,13,N}$ für die Dreiecke $\Delta_{r,13}$, $r = 0, 5$, zu Knotenmengen mit Knotenzahl N für die Polynomgrade $n = 2, 3, \dots, 6$.

Wir möchten im nächsten Abschnitt einen kleinen Einblick in die Größenordnung der berechneten Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ geben. Dazu haben wir die Maxima der nichtnegativen Gewichte, $\lambda_{\max,n,r,j,N}^+$, die Minima der negativen Gewichte, $\lambda_{\min,n,r,j,N}^-$, die Mittelwerte der nichtnegativen und negativen Gewichte, $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^-$, und die Standardabweichungen der nichtnegativen und negativen Gewichte, $\sigma_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\sigma_{n,r,j,N}^-$, zu einigen Knotenmengen $C_{r,j,N}$ mit verschiedenen großen Knotenzahlen N für Polynomgrade

$n = 2, 3, \dots, 6$ für unsere Testdreiecke ermittelt und für Polynomgrad $n = 6$ und Knotenzahl $N = 100$ und ebenso für $n = 2$ und $N = 289$ in Abbildung 3.7 graphisch dargestellt.

- Der Verlauf der Kurven über die Dreiecksindizes j ähnelt derjenigen der zu den Dreiecken zugehörigen Quotienten $F_{r,j}/A_r$ aus Dreiecksfläche $F_{r,j}$ und Kappenfläche A_r (siehe Abbildung 2.21). D. h. Maxima, Minima, Mittelwerte usw. der berechneten Gewichte für Dreiecke, bei denen die Dreiecksfläche im Verhältnis zur Kappenfläche größer ist, sind ebenfalls höher (betrifft die nichtnegativen Gewichte) bzw. niedriger (betrifft die negativen Gewichte) im Wert als bei Dreiecken, deren Quotient $F_{r,j}/A_r$ kleiner ist.
- Bei $n = 6$ und $N = 100$, als Beispiel für einen relativ großen Polynomgrad und eine verhältnismäßig kleine Knotenzahl, verlaufen die Kurven für die positiven Werte fast spiegelbildlich zu denjenigen der negativen Werte; die Absolutwerte der negativen Werte sind nur wenig geringer als die zugehörigen nichtnegativen Werte.
- Je größer die Knotenzahl oder je kleiner der Polynomgrad, desto kleiner sind die Absolutwerte der negativen Minima, Mittelwerte usw. im Vergleich zu den korrespondierenden Werten der nichtnegativen Gewichte. Bei $n = 2$ und $N = 289$ beispielsweise liegen bei allen Testdreiecken $\Delta_{5,j}$ keine negativen Gewichte vor.
- Die Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ erfüllen nach Konstruktion das Kleinste-Quadrate-Problem

$$\min_{\alpha \in \mathbb{C}^N} \|\alpha\|_2^2, \quad \mathbf{Y}_{n,r,j,N} \alpha = \hat{\mathbf{b}}_{n,r,j}.$$

Die Varianz der Gewichte lautet $\sigma_{n,r,j,N}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{k=1}^N (\bar{\lambda}_{n,r,j,N} - \lambda_{n,r,j,N,k})^2$. Umformungen liefern den Ausdruck

$$\sigma_{n,r,j,N}^2 = \frac{N}{N-1} \left(\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \lambda_{n,r,j,N,k}^2 - \bar{\lambda}_{n,r,j,N}^2 \right).$$

Da $\sum_{k=1}^N \lambda_{n,r,j,N,k}^2 = \|\lambda_{n,r,j,N}\|_2^2$ minimal ist, ist die Streuung $\sigma_{n,r,j,N}$ minimal. Am Beispiel $n = 2$ und $N = 289$ können wir erkennen, dass die Streuung der Gewichte tatsächlich relativ klein ist.

Aus unseren Testdreiecken greifen wir das Dreieck $\Delta_{5,13}$ heraus und stellen in der Abbildung 3.8 die Maxima, Minima, Mittelwerte usw. der Gewichte für verschiedene Knotenzahlen und Polynomgrade dar.

- Die Größe der nichtnegativen Gewichte bzw. die Absolutbeträge der negativen Gewichte nehmen erwartungsgemäß mit zunehmender Knotenzahl N oder kleiner werdendem Polynomgrad n ab.
- Weiterhin können wir beobachten, dass die Standardabweichungen $\sigma_{n,r,j,N}^+$ und $|\sigma_{n,r,j,N}^-|$ bei kleinerem Polynomgrad bzw. Knotenmengen $C_{r,j,N}$ mit größeren Knotenzahlen N kleiner als bei größeren Polynomgraden bzw. kleineren Zahlen N sind. Ein kleinerer Polynomgrad oder eine größere Anzahl an Knoten bringt also eine geringere Streuung der Gewichte um den Mittelwert mit sich.

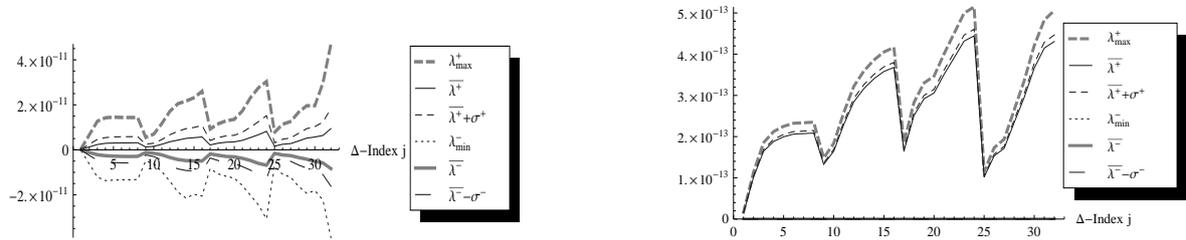


Abbildung 3.7: Darstellung der Maxima λ_{\max}^+ , Minima λ_{\min}^- , Mittelwerte, $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^-$, der Werte $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^+ + \sigma_{n,r,j,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^- - \sigma_{n,r,j,N}^-$ der Gewichte $\lambda_{n,r,j,N}$ der Dreiecke $\Delta_{r,j}$, $r = 5$, zu Knotenmengen $C_{r,j,N}$. **Linkes Bild:** Polynomgrad $n = 6$, Knotenzahl $N = 100$. **Rechtes Bild:** Polynomgrad $n = 2$, Knotenzahl $N = 289$; die Werte λ_{\min}^- , $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^-$, $\bar{\lambda}_{n,r,j,N}^- - \sigma_{n,r,j,N}^-$ sind gleich Null.

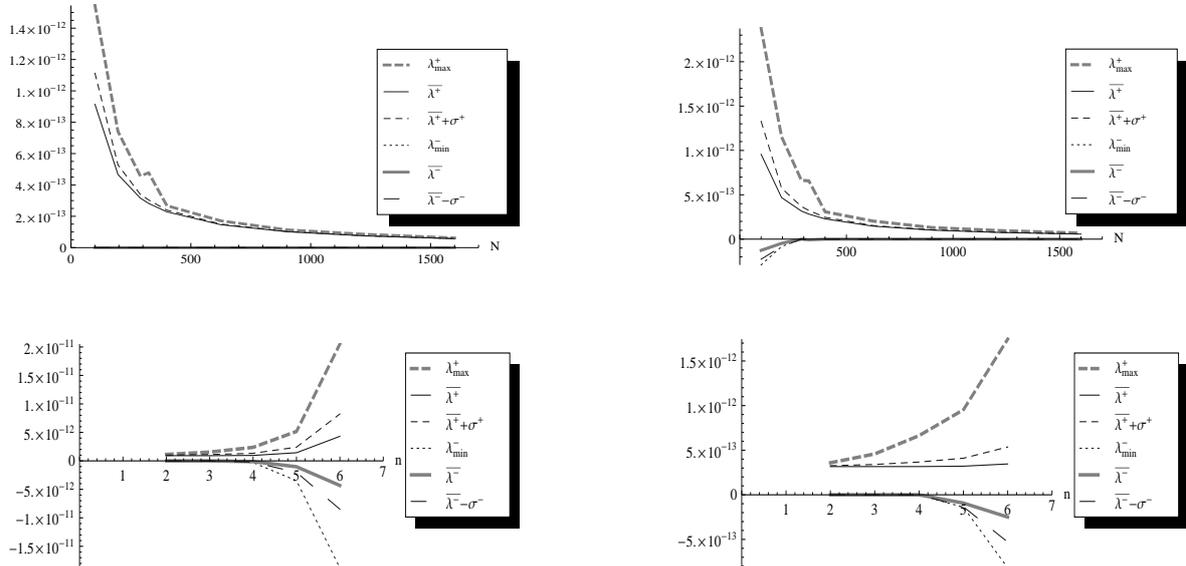


Abbildung 3.8: Darstellung der Maxima der nichtnegativen Gewichte, λ_{\max}^+ , Minima der negativen Gewichte, λ_{\min}^- , Mittelwerte der nichtnegativen und negativen Gewichte, $\bar{\lambda}_{n,5,13,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,5,13,N}^-$, der Werte $\bar{\lambda}_{n,5,13,N}^+ + \sigma_{n,5,13,N}^+$ bzw. $\bar{\lambda}_{n,5,13,N}^- - \sigma_{n,5,13,N}^-$ der Gewichte $\lambda_{n,5,13,N}$ zu Knotenmengen $C_{5,13,N}$ am Beispiel des Dreiecks $\Delta_{5,13}$. **Linkes Bild oben:** Polynomgrad $n = 3$. **Rechtes Bild oben:** Polynomgrad $n = 3$. **Linkes Bild unten:** Knotenzahl $N = 100$. **Rechtes Bild unten:** Knotenzahl $N = 289$.

3.5 Testrechnung an Beispielen einer Triangulierung der Sphäre

In diesem Abschnitt dokumentieren wir einige Resultate, die wir aus Testrechnungen an Triangulierungen T der Sphäre gewonnen haben. Wir nutzen die Triangulierungen T_1 und T_2 aus Kapitel 2.6, die wir schon für die Gauß-Quadratur verwendet haben.

In jedem Dreieck Δ_j , $j = 1, 2, \dots, |T|$, generiert der Algorithmus aus [1] eine Knotenmenge $C_j = \{\mathbf{y}_{j,k}\}_{k=1}^N$ mit N Elementen. Wir berechnen für Polynomgrad n mit Algorithmus II für jedes Dreieck Δ_j zu C_j die Gewichte $\lambda_{n,j,N}$. Unsere Beispielrechnungen führen wir wieder wie im Kapitel 2.6 mit Mathematica 7 auf einem Rechner mit Intel(R) Core(TM) 2 Quad CPU Q9550 Prozessor, 2.83 GHz Taktfrequenz, 4.00 GB RAM, 32 Bit-Betriebssystem Windows Vista Business durch. Die Zeiten gibt Mathematica mit dem Befehl AbsoluteTiming aus, dabei ist $t_{\text{Gauß}}^{(T;n)}$ die Zeit, die wir zur Berechnung der Gauß-Gewichte und -Knoten aller Dreiecke einer Triangulierung T benötigen (abhängig von der Geometrie der Dreiecke und n), und $t_{\text{AlgII}}^{(n,N,|T|)}$ die Gesamtzeit zur Berechnung aller Gewichte $\lambda_{n,j,N}$, $j = 1, 2, \dots, |T|$, mit Algorithmus II (abhängig von n , Knotenzahl N und Anzahl der Dreiecke $|T|$). Unter $t_{\text{ges}}^{(T;n,N)}$ verstehen wir dann die Summe $t_{\text{Gauß}}^{(T;n)} + t_{\text{AlgII}}^{(n,N,|T|)}$. Bei jedem Dreieck bestimmen wir die Anzahl der negativen Gewichte $N_{n,j,N}^-$, die sich über alle Dreiecke von T zu $N_{n,N}^{(-,T)}$ summieren (abhängig von der Geometrie der Dreiecke, n und N).

Die Testergebnisse fassen wir in den folgenden Tabellen zusammen:

T	n	$ T $	N	$ T \times N$	$t_{\text{Gauß}}^{(T;n)}/h$	$t_{\text{AlgII}}^{(n,N, T)}/h$	$t_{\text{ges}}^{(T;n,N)}/h$
T_1	3	212	400	84800	0.259	0.277	0.536
T_1	4	212	400	84800	0.308	0.549	0.857
T_2	2	573	900	515700	0.763	0.744	1.507
T_2	3	573	900	515700	1.097	1.719	2.816
T_2	3	573	1764	1010772	1.070	3.586	4.656

T	n	$ T $	N	$ T \times N$	$N_{n,N}^{(-,T)}$	$\sum_{j=1}^{ T } \sum_{k=1}^N \lambda_{n,j,N,k} / (4\pi)$
T_1	3	212	400	84800	0	1.0000000000000000
T_1	4	212	400	84800	1	1.000000489510776
T_2	2	573	900	515700	0	1.0000000000000000
T_2	3	573	900	515700	0	1.0000000000000000
T_2	3	573	1764	1010772	0	1.0000000000000000

Von besonderem Interesse ist die Fehleruntersuchung über die gesamte Sphäre, wie wir sie schon für die Gauß-Quadratur im Kapitel 2.6 durchgeführt haben (vergleiche (2.61)). Wir stellen die Vektoren

$$\mathbf{v}_{n,p} = \left(\sum_{j=1}^{|T|} \sum_{k=1}^N \lambda_{n,j,N,k} Y_s(\mathbf{y}_{j,k}) \right)_{s=1}^{(p+1)^2}, \quad p = 0, 1, \dots, n,$$

auf und bestimmen die Fehler

$$E_{\{1,2,\infty\},n,p} = \frac{\|\mathbf{v}_{n,p} - \sqrt{4\pi}\mathbf{e}_{1,p}\|_{\{1,2,\infty\}}}{\|\sqrt{4\pi}\mathbf{e}_{1,p}\|_{\{1,2,\infty\}}}, \quad (3.21)$$

wobei $\mathbf{e}_{1,p} := (1, 0, \dots, 0)^\top$ mit Länge $(p+1)^2$ gewählt ist und $\|\circ\|_2$ die euklidische Vektornorm, $\|\circ\|_1$ die L_1 -Norm und $\|\circ\|_\infty$ die Maximumnorm bezeichnet (siehe z. B. [31, S. 30]). Zusätzlich berechnen wir die Werte $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ auch für einige $p > n$.

Wir erinnern daran, dass durch die Art, wie die Triangulierung T_2 generiert worden ist, der Quotient $|\sum_{j=1}^{|T_2|} F_j - 4\pi|/(4\pi) \approx 10^{-16}$ ist. Kleiner können die Fehler $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ nicht werden. Tatsächlich sind die Fehler $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ für p mit $0 \leq p \leq n$ von einer Größenordnung zwischen 14 und 16. Wie erwartet fallen sie bei $p = n+1$ deutlich ab (siehe Abbildung 3.9).

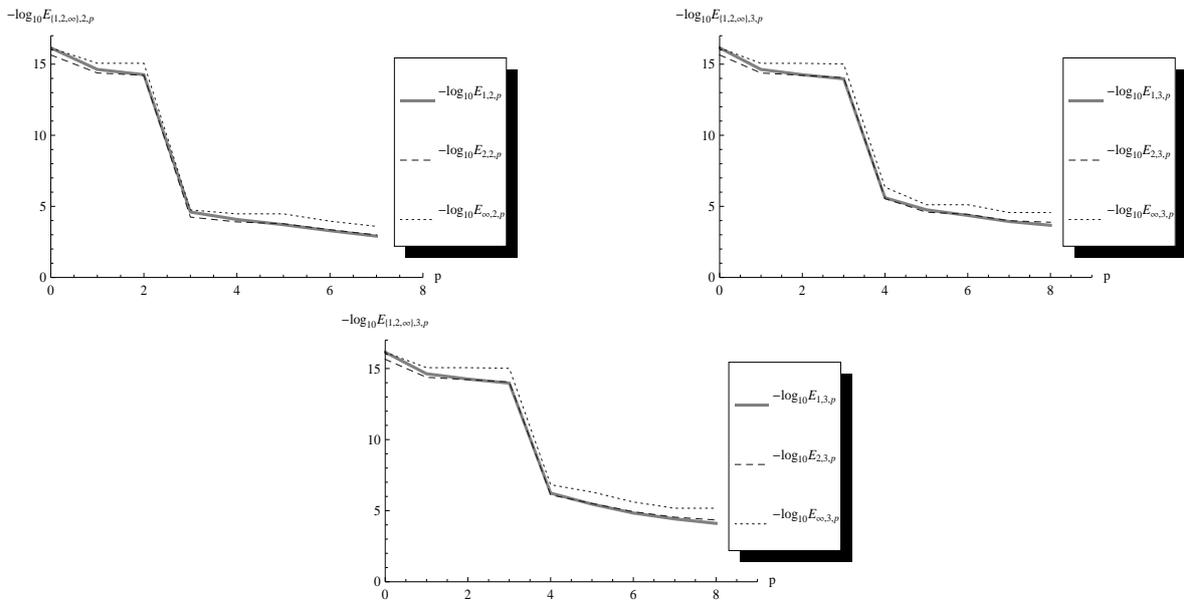


Abbildung 3.9: Fehlerwerte $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ der Quadratur für Dreiecke der Triangulierung T_2 bei gegebenem Polynomgrad $n = 2$ und $N = 900$ Knoten (**Bild links oben**), bei Polynomgrad $n = 3$ und $N = 900$ Knoten (**Bild rechts oben**) und bei Polynomgrad $n = 3$ und $N = 1764$ Knoten (**Bild unten**) pro Dreieck.

Dass die Größe der Parameter ϵ des Gautschi-Algorithmus (vergleiche Algorithmus 1.16) auch die Fehler $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ für beliebige Knoten beeinflusst, die Wahl der ϵ -Werte wirkt sich ja auf die Anzahl der korrekten Stellen der Einträge der Vektoren $\hat{\mathbf{b}}$ aus, kann die Fehlerbestimmung über die Triangulierung T_1 zeigen. Bei unserer Wahl der ϵ -Parameter (10^{-30} oder 10^{-40} je nach Dreieck) bei $n = 3$ erhalten wir Gewichte $\lambda_{n,j,N,1}, \dots, \lambda_{n,j,N,N}$, für die die Fehler $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ in der Größenordnung 10^{-30} liegen. Verkleinern wir die Parameter auf ϵ^2 , so verringern sich die Fehler $E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ bei $p = 0, 1, 2, 3$ (in unserem Beispiel etwa um Faktor 10^{-29} , siehe Abbildung 3.10).

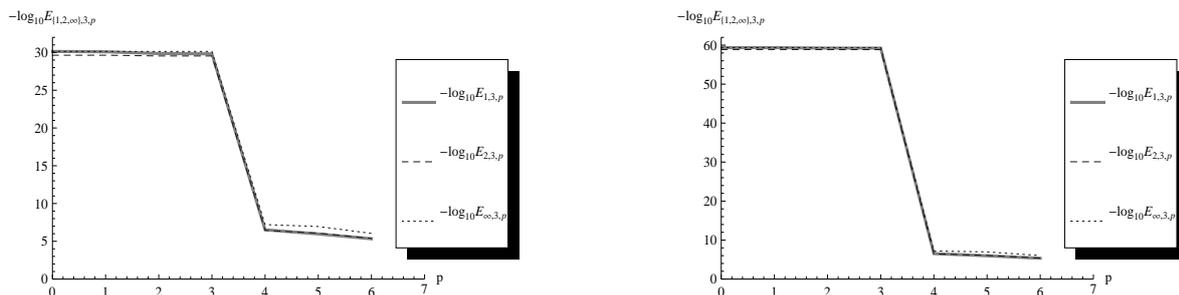


Abbildung 3.10: Fehlerwerte $-\log_{10} E_{\{1,2,\infty\},n,p}$ der Quadratur für Dreiecke der Triangulierung T_1 bei gegebenem Polynomgrad $n = 3$ und $N = 400$ Knoten pro Dreieck; **(Bild links:)** mit einfachen ϵ -Parametern; **(Bild rechts:)** mit Parametern ϵ^2 im Gautschi-Algorithmus.

3.6 Testrechnungen mit Beispielfunktion

Mit der endlichen Menge $T = \{\Delta_j\}$ liege eine Triangulierung der Sphäre vor. Zu jedem Dreieck Δ_j gehöre eine Knotenmenge $C_{j,N_j} = \{\mathbf{y}_{j,k}\}_{k=1}^{N_j}$, wobei $C_{j,N_j} \subset \Delta_j$. Insgesamt ergibt dies eine Datenmenge von $M := \sum_{j=1}^{|T|} N_j$ beliebigen Knoten auf der Sphäre. Für Polynomgrad n berechnen wir mit Algorithmus II zu jeder Knotenmenge C_{j,N_j} , $j = 1, 2, \dots, |T|$, die Quadraturgewichte $\lambda_{n,j,N_j,k}$, $k = 1, 2, \dots, N_j$.

Es sei eine (Riemann-) integrierbare Funktion f auf der Sphäre gegeben, die auf einem relativ kleinen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{S}^2$ gut lokalisiert sei. Wir nehmen an, dass wir im Gebiet Ω , durch eine Häufung an Knoten $\mathbf{y}_{j,k}$ und bekannten Funktionswerten $f(\mathbf{y}_{j,k})$, relativ viele Informationen über die Funktion haben, während im Restgebiet $\mathbb{S}^2 \setminus \{\Omega\}$ deutlich weniger Datenpaare $(\mathbf{y}_{j,k}, f(\mathbf{y}_{j,k}))$ bekannt sind.

Kennen wir den Wert des Integrals $I(f) = \int_{\mathbb{S}^2} f(\mathbf{x}) d\xi(\mathbf{x})$, dann ergibt sich für unsere Quadraturformel $Q_{n,M}(f) = \sum_{j=1}^{|T|} \sum_{k=1}^{N_j} \lambda_{n,j,N_j,k} f(\mathbf{y}_{j,k})$ der relative Quadraturfehler

$$\hat{E}_{n,M} := \frac{|I(f) - Q_{n,M}(f)|}{|I(f)|}. \quad (3.22)$$

Für unsere Testrechnungen wählen wir eine Sprungfunktion. Mit P_1, P_2, P_3 und P_4 liegen vier sich voneinander unterscheidende Punkte auf der Sphäre vor, sie bilden die Ecken der Dreiecke $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ und $\Delta(P_3, P_4, P_1)$. Für die Sprungfunktion gelte

$$f(\mathbf{x}) := \begin{cases} 1, & \text{falls } \mathbf{x} \in \Delta(P_1, P_2, P_3) \cup \Delta(P_3, P_4, P_1), \\ 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$

Die Triangulierung T_3 bestehe aus insgesamt 315 sphärischen Dreiecken Δ_j . Davon haben 59 einen Flächeninhalt zwischen 0.1767 und 0.2620, die Mehrheit von 256 sphärischen Dreiecken einen Flächeninhalt zwischen $0.7271 \cdot 10^{-3}$ und $0.1449 \cdot 10^{-2}$. Nach der Triangulierung der Sphäre in 60 größere Dreiecke mit dem Algorithmus aus [29] haben wir die Fläche eines der Dreiecke in 256 weitere, kleinere Dreiecke aufgeteilt. Diesen letzten Schritt haben wir mit einer Genauigkeit von etwa 10^{-16} durchgeführt, d. h. $|\sum_{j=1}^{|T_3|} F_j - 4\pi|/(4\pi) \approx 10^{-16}$, wobei $\sum_{j=1}^{|T_3|} F_j$ die Summe der Flächeninhalte der Dreiecke Δ_j ist. Die Dreiecke $\Delta(P_1, P_2, P_3)$ und $\Delta(P_3, P_4, P_1)$ sind im Inneren des Dreiecks, das in

256 kleinere Dreiecke aufgeteilt worden ist, lokalisiert. Für 93 von ihnen, wir bezeichnen sie mit Δ_j , $j = 1, 2, \dots, 93$, ist die Schnittmenge mit $\Delta(P_1, P_2, P_3) \cup \Delta(P_3, P_4, P_1)$ nicht leer.

Zu drei verschiedenen Knotenmengen über die Sphäre, die der Algorithmus aus [1] generiert, bestimmen wir Quadraturgewichte.

1. Anzahl N_j der Knoten in jedem Dreieck ist gleich 3600.
2. Die Mengen C_{j,N_j} , $j = 1, 2, \dots, 93$, bestehen aus 7225 Knoten, jeweils 1600 Knoten umfassen die Knotenmengen C_{j,N_j} , $j = 94, 95, \dots, 315$.
3. Die Anzahl N_j der Knoten der Mengen C_{j,N_j} , $j = 1, 2, \dots, 93$, ist gleich 14400, diejenige der übrigen Mengen C_{j,N_j} gleich 1600.

Die Quadraturgewichte zu den Knoten liefert Algorithmus II aus Kapitel 3.3. Für Polynomgrad $n = 3$ bestimmen wir

- die Gesamtzahl M der Knoten, zu denen Gewichte berechnet werden,
- die Berechnungszeit für die Gauß-Quadratur, $t_{\text{Gauß}}^{(T;n)}$, als Gesamtzeit über alle Dreiecke der Triangulierung T_3 ,
- die Berechnungszeit für die Berechnung der Gewichte mit Algorithmus II, $t_{\text{AlgII}}^{(n,M)}$, als Gesamtzeit über alle Dreiecke der Triangulierung T_3 ,
- die Gesamtberechnungszeit $t_{\text{ges}}^{(T;n,M)}$ als Summe der Zeiten $t_{\text{Gauß}}^{(T;n)}$ und $t_{\text{AlgII}}^{(n,M)}$ plus der Zeit für die Auswertung der Testfunktion.

Die Testrechnungen führen wir mit Mathematica 7 auf demselben Rechner wie im vorherigen Kapitel aus und fassen die ermittelten Werte in folgender Tabelle zusammen:

T	n	$N_j, j \in [1, 93]$	M	$t_{\text{Gauß}}^{(T;n)}/h$	$t_{\text{AlgII}}^{(n,M)}/h$	$t_{\text{ges}}^{(T;n,M)}/h$
T_3	3	3600	1134000	0.322	3.877	4.251
T_3	3	7225	1027125	0.322	3.527	3.952
T_3	3	14400	1694400	0.322	5.749	6.274

Wir berechnen außerdem

- die Anzahl $N_{n,M}^{(-,T)}$ der negativen Gewichte,
- den Fehler $E_{2,n,n}$ aus (3.21),
- den Quadraturfehler $\hat{E}_{n,M}$ aus (3.22), wobei der Wert des Integrals gleich dem Flächeninhalt des Polygons $\Delta(P_1, P_2, P_3) \cup \Delta(P_3, P_4, P_1)$ ist. In unserem Beispiel ist dieser gleich 0.07529.

Wir erhalten für unsere Testdaten die Fehler

T	n	$N_j, j \in [1, 93]$	M	$N_{n,M}^{(-,T)}$	$E_{2,n,n}$	$\hat{E}_{(n,M)}$
T_3	3	3600	1134000	0	$2.802 \cdot 10^{-15}$	$1.354 \cdot 10^{-4}$
T_3	3	7225	1027125	0	$2.802 \cdot 10^{-15}$	$3.028 \cdot 10^{-5}$
T_3	3	14400	1694400	0	$2.802 \cdot 10^{-15}$	$6.575 \cdot 10^{-5}$

Da wir bei der Triangulierung der Sphäre einen Fehler von etwa 10^{-16} in Kauf nehmen, kann der Fehler $E_{2,n,n}$ nicht kleiner sein. Die Testrechnungen zeigen, dass die berechneten Quadraturformeln Spherical Harmonics bis zum Grad $n = 3$ exakt integrieren können. Alle Gewichte sind nichtnegativ. Die Quadraturformel mit $N_j = 3600$, $j = 1, 2, \dots, 93$, Knoten berechnet den Flächeninhalt des Polygons mit einem relativen Fehler der Größenordnung 10^{-4} . Erhöhen wir die Anzahl der Knoten in dem entschiedenen Bereich der Sphäre, dann ist der relative Fehler von der Größenordnung 10^{-5} .

Uns hat interessiert, wie gut eine globale Quadraturformel, mit solch geclusterten Knoten, den Flächeninhalt berechnen kann. Gräf, Kunis und Potts beschreiben in [15] eine CGNR-Methode zur Berechnung von Quadraturgewichten zu gegebenen Knoten auf der Sphäre. Zu gleichförmig verteilten Knoten liefert die Methode nichtnegative Gewichte, wobei der Höchstgrad n , für den die Quadraturformel exakt ist, sehr hoch ist. Sind die Knoten nicht so gut verteilt, dann geht das Verfahren so vor, dass es zunächst zu allen Knoten Gewichte berechnet, alle Knoten mit negativen Gewichten dann entfernt werden und die Berechnung für die übriggebliebenen Knoten wiederholt wird. Dieses Vorgehen wird so lange wiederholt, bis im besten Fall alle Gewichte nichtnegativ sind.

Manuel Gräf hat freundlicherweise mit der CGNR-Methode zu unseren zweiten Testknoten mit $M = 1027125$ für Polynomgrad $n = 150$ Gewichte berechnen lassen. Der Algorithmus setzt fast die Hälfte der Gewichte auf Null, der relative Quadraturfehler beträgt $1.9 \cdot 10^{-3}$. Für kleine Polynomgrade sind fast alle Gewichte im Bereich des Polygons gleich Null, der relative Fehler ist gleich Eins oder größer.

Für solch einen speziellen Fall, wenn von einer gut lokalisierten Funktion in dem entsprechenden Bereich eine relativ hohe Anzahl an Daten bekannt ist, kann es von Vorteil sein, anstatt mit einer globalen mit einer lokalen Quadratur numerisch zu integrieren.

Literaturverzeichnis

- [1] J. Arvo, Stratified Sampling of Spherical Triangles, ACM, SIGGRAPH '95: Proceedings of the 22nd annual conference on Computer graphics and interactive techniques, New York, 1995, 437–438.
- [2] Å. Björck, *Numerical Methods for Least Squares Problems*, SIAM, Philadelphia, 1996.
- [3] M. Conrad, *Approximation und Multiskalenzerlegung auf der Sphäre*, Diplomarbeit, Hamburg, 2001.
- [4] R. Courant, H. Robbins, *Was ist Mathematik?*, Springer, Berlin, 1992.
- [5] Ph. J. Davis, *Interpolation and Approximation*, Dover Publications, Inc., New York, 1975.
- [6] Ph. J. Davis, Ph. Rabinowitz, *Methods of numerical integration*, Academic Press, Boston, 1984.
- [7] H. Engels, *Numerical Quadrature and Cubature*, Academic Press, London, 1980.
- [8] G. E. Fasshauer, L. L. Schumaker, Scattered Data Fitting on the Sphere, in M. Dæhlen (ed.) et al., *Mathematical Methods for Curves and Surfaces II*, 2nd international conference, Lillehammer, Norway, July 3–8, 1997, Nashville, TN: Vanderbilt University Press, 1998, 117–166.
- [9] B. Fischer, *Polynomial Based Iteration Methods for Symmetric Linear Systems*, Wiley-Teubner, Chichester, Stuttgart, 1996.
- [10] W. Freeden, T. Gervens, M. Schreiner, *Constructive Approximation on the Sphere: with Applications to Geomathematics*, Clarendon Press, Oxford, 1998.
- [11] W. Gautschi, On Generating Orthogonal Polynomials, *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* **3**(3) (1982), 289–317.
- [12] W. Gautschi, *Orthogonal Polynomials: Computation and Approximation*, Oxford University Press, Oxford, 2004.
- [13] W. Gautschi, Orthogonal polynomials (in Matlab), *J. Comput. Appl. Math.* **178**(1–2) (2005), 215–234.

-
- [14] W. Gautschi, Package OPQ: a Matlab Suite of Programs for Generating Orthogonal Polynomials and Related Quadrature Rules, <http://www.cs.purdue.edu/archives/2002/wxg/codes>.
- [15] M. Gräf, S. Kunis, D. Potts, On the computation of nonnegative quadrature weights on the sphere, *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **27**(1) (2009), 124–132.
- [16] W. B. Gragg, W. J. Harrod, The Numerically Stable Reconstruction of Jacobi Matrices from Spectral Data, *Numer. Math.* **44**(3) (1984), 317–335.
- [17] Ø. Hjelle, M. Dæhlen, *Triangulations and Applications*, Springer, Berlin, 2006.
- [18] K. Jetter, J. Stöckler, J. D. Ward, Norming sets and spherical cubature formulas, in Zh. Chen (ed.) et al., *Advances in computational mathematics*, Proceedings of the Guangzhou international symposium, Zhongshan University, Guangzhou, China, New York, NY: Marcel Dekker, *Lect. Notes Pure Appl. Math.* 202, 1998, 237–244.
- [19] A. Lamnii, H. Mraoui, D. Sbilih, A. Zidna, A multiresolution method for fitting scattered data on the sphere, *BIT Numer. Math.* **49**(3) (2009), 589–610.
- [20] J. Keiner, S. Kunis, D. Potts, Efficient reconstruction of functions on the sphere from scattered data, *J. Fourier Anal. Appl.* **13**(4) (2007), 435–458.
- [21] K. Königsberger, *Analysis 1*, Springer, Berlin, 1995.
- [22] Mathematica Documentation Center von Mathematica 7, Tutorial Numerical Precision.
- [23] H. N. Mhaskar, Local quadrature formulas on the sphere. II., in M. Neamtu (ed.) et al., *Advances in constructive approximation: Vanderbilt 2003*, Proceedings of the international conference, Nashville, TN, USA, May 14–17, 2003, Brentwood, TN: Nashboro Press., *Modern Methods in Mathematics*, 2004, 333–344.
- [24] H. N. Mhaskar, Q. T. Le Gia, Localized linear polynomial operators and quadrature formulas on the sphere, *SIAM J. Numer. Anal.* **47**(1) (2008), 440–466.
- [25] H. N. Mhaskar, F. J. Narcowich, J. D. Ward, Spherical Marcinkiewicz-Zygmund inequalities and positive quadrature, *Math. Comp.* **70**(235) (2001), 1113–1130.
- [26] H. N. Mhaskar, F. J. Narcowich, J. D. Ward, On the representation of band-dominant functions on the sphere using finitely many bits, *Adv. Comput. Math.* **21**(1–2) (2004), 127–146.
- [27] M. Reimer, *Multivariate Polynomial Approximation*, Birkhäuser Verlag, Basel, 2003.
- [28] R. J. Renka, Interpolation of Data on the Surface of a Sphere, *ACM Trans. Math. Softw.* **10**(4) (1984), 417–436.
- [29] R. J. Renka, Algorithm 772: STRIPACK: Delaunay Triangulation and Voronoi Diagram on the Surface of a Sphere, *ACM Trans. Math. Softw.* **23**(3) (1997), 416–434.

-
- [30] J. Prestin, D. Roşca, Cubature formulae on the sphere, *J. Approximation Theory* **142**(1) (2006), 1–19.
- [31] H. R. Schwarz, *Numerische Mathematik*, Teubner, Stuttgart, 1997.
- [32] I. H. Sloan, R. S. Womersley, Extremal systems of points and numerical integration on the sphere, *Adv. Comput. Math.* **21**(1–2) (2004), 107–125.
- [33] J. Stoer, *Numerische Mathematik 1*, Springer, Berlin, 1999.
- [34] G. Szegő, *Orthogonal Polynomials*, AMS Colloquium Publications, Volume 23, American Mathematical Society, Providence (Rhode Island), 1991.
- [35] E. Zeidler (Hrsg.), *Teubner-Taschenbuch der Mathematik*, B. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1996.