



Mathematik
Angewandte Funktionalanalysis

Diplomarbeit

Stabilität bei der polynomialen Approximation auf der Rotationsgruppe

Manuel Gräf

Chemnitz, den 15. Juli 2008

Betreuer: Prof. Dr. Daniel Potts
Dr. Stefan Kunis

Gräf, Manuel

Stabilität bei der polynomialen Approximation auf der Rotationsgruppe

Diplomarbeit, Mathematik

Technische Universität Chemnitz, Juli 2008

Danksagung

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Daniel Potts und Herrn Dr. Stefan Kunis, beide haben mit großem Engagement und hilfreichen Ratschlägen zum Gelingen der Arbeit beigetragen. Vor allem möchte ich aber meinen Eltern danken, ohne die dieses Studium nicht möglich gewesen wäre.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	7
2	Grundlagen	9
2.1	Bezeichnungen	9
2.2	Funktionsräume	10
2.3	Chebyshev-Polynome	11
2.4	Polynomiale Splines	14
2.5	Rotationsgruppe	15
2.6	Iterative Rekonstruktion	18
3	Abtastmengen	19
3.1	Konstruktionen mittels der Achse-Rotationswinkel Darstellung	22
3.2	Eine Konstruktion mittels der Euler-Winkel Darstellung	27
4	Interpolation	33
4.1	Konstruktion lokalisierter trigonometrischer Polynome	35
4.1.1	Die Lokalisierungseigenschaft	35
4.1.2	Schranken für $\ g\ _{1,N}$	39
4.1.3	Konstruktion mittels perfekter B-Splines	45
4.2	Stabilität	48
4.2.1	Minimale 2-Norm Interpolation	49
4.2.2	Minimale Sobolev-Norm Interpolation	55
5	Approximation	59
5.1	Stabilität und Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen	60
6	Auswertung/Ausblick	65
6.1	Resultate	65
6.2	Offene Probleme	65

1 Einleitung

Das allgemeine Problem der Approximation oder Rekonstruktion einer unbekanntes Funktion aus gegebenen Abtastwerten und Abtastpunkten (engl.: scattered data approximation) findet in den verschiedensten Bereichen der Natur-, Ingenieur- und Computerwissenschaften Anwendung. In dieser Arbeit liegt das Augenmerk auf der Approximation von komplexwertigen Funktionen, die auf der Rotationsgruppe definiert sind. Solche Funktionen treten z.B. bei der Behandlung von Aufgaben der Kristallographie [4] und bei der Bearbeitung sogenannter „protein-protein docking“-Probleme [7] in der Molekularbiologie auf. Wir untersuchen zur Approximation von Funktionen auf der Rotationsgruppe zum einen Interpolationsaufgaben und zum anderen kleinste Quadrate Probleme. Diese Probleme lassen sich auf das Lösen von linearen Gleichungssystemen zurückführen. Da mit den $\mathcal{SO}(3)$ -FFTs [20, 26] auf der Rotationsgruppe schnelle Algorithmen für Matrixvektormultiplikationen der dabei auftretenden Matrizen zur Verfügung stehen, können wir in Verbindung mit dem iterativen CG-Verfahren Algorithmen zur Lösung dieser Probleme angeben. Die Stabilität dieser Algorithmen können wir dann an Hand der Konditionszahlen der entsprechenden Systemmatrizen bewerten. Für die Abschätzung der Konditionszahlen werden wir Methoden verwenden, die bereits erfolgreich auf ähnliche Problemstellungen, wie z.B. bei der polynomialen Approximation auf dem Torus [21] oder der Sphäre [18], angewendet wurden.

In Kapitel 2 führen wir die benötigten mathematischen Grundlagen und Bezeichnung ein. Dabei werden wir zunächst allgemeine Räume definieren und uns dann mit besonderen Eigenschaften der Chebyshev-Polynome vertraut machen. Für die später vorgestellte Konstruktion lokalisierter trigonometrischer Polynome werden wir spezielle Spline-Räume einführen. Abschließend werden die für die Analysis auf der Rotationsgruppe benötigten Grundlagen behandelt.

In Kapitel 3 beschäftigen wir uns mit endlichen Teilmengen, den Abtastmengen, der Rotationsgruppe. Es werden dabei die später benötigten Begriffe des Separationsabstandes, der Maschenweite und der Voronoi-Partition eingeführt. Weiterhin werden Schranken der Kardinalität der Abtastmenge in Abhängigkeit des Separationsabstandes hergeleitet (Lemma 3.1), die für das in Kapitel 4 behandelte Interpolationsproblem benötigt werden. Dabei konnte die Abschätzung aus [11, Lemma 5.1] verbessert werden. Zusätzlich werden noch Formeln für die Abstandsberechnung zweier Rotation in Euler-Winkel bzw. Achse-Rotationswinkel Darstellung hergeleitet (Lemmata 3.2, 3.7) und weiter untersucht. Auf deren Grundlage werden wir dann Algorithmen zur Konstruktion relativ gleichmäßig verteilter Abtastmengen angeben.

Das Kapitel 4 befasst sich mit dem polynomialen Interpolationsproblem auf der Rotationsgruppe. Um Stabilitätsaussagen zu gewinnen, werden zunächst trigonometrische Polynome auf eine gewisse Lokalisierungseigenschaft hin untersucht. Die entsprechenden Abschätzungen werden wir dabei auf zwei Vorgehensweisen mit jeweils unterschiedlichem Vorteil gewinnen. Die auf [21, Lemma 3.2] bauende kontinuierliche Variante (Satz 4.9) liefert für „genügend glatte“ Fourier-Koeffizienten bessere Konstanten, während die diskrete Variante (Satz 4.3) auch auf beliebige Fourier-Koeffizienten anwendbar ist. Die Entwicklung einer verallgemeinerten Euler-Maclaurinschen Summenformel (Satz 4.12) mit Hilfe des Stieltjes-Integrals liefert zusätzlich eine Verbesserung der in [21, Lemma 3.2] angegebenen Abschätzung für die Summennorm einer Abtastfolge. Durch Abtasten perfekter Splines werden wir damit besonders gut lokalisierte trigonometrische Polynome konstruieren, mit deren Hilfe wir schließlich

zur Hauptaussage (Satz 4.17) des Kapitels 4 kommen. Es wird sich zeigen, dass die einfache Bedingung, den Polynomgrad bis auf ein konstantes Vielfaches gegen den inversen Separationsabstand der Abtastmenge nach unten zu beschränken, für die Existenz eines polynomialen Interpolanten bestmöglich ist. Weiterhin werden wir noch Konditionsabschätzungen am Beispiel ausgewählter Interpolationsprobleme angeben. Dabei gelingt es mittels einer erweiterten Vergleichsmethode sogar die Konditionszahl des Problems der minimalen 2-Norm Interpolation gleichmäßig abzuschätzen (Satz 4.19), wiederum falls der Polynomgrad bis auf eine Konstante indirekt proportional zum Separationsabstand der Abtastmenge gewählt wird. Schließlich werden wir sehen, dass sich mit der selben Vergleichsmethode wie in [9] auch für nichtpolynomiale Interpolationsprobleme Stabilitätsaussagen gewinnen lassen.

Kapitel 5 widmet sich der gewichteten kleinste Quadrate Approximation von Polynomen auf der Rotationsgruppe. Dabei wird der Zusammenhang der Stabilität des Approximationsproblems zu Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen auf der Rotationsgruppe wie in [29] aufgezeigt. Hier wird sich neben dem Polynomgrad auch die Maschenweite der Abtastmenge als wesentlicher Parameter für die Konditioniertheit der polynomialen Approximation herausstellen ([29], Folgerung 5.3). Mit Hilfe der in Kapitel 4 erarbeiteten Resultate werden wir zum Schluss ein interessantes Ergebnis probabilistischer Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen der Sphäre [6, Theorem 4.3] auf den Fall der Rotationsgruppe übertragen können (Satz 5.6).

2 Grundlagen

2.1 Bezeichnungen

Mit \mathbb{N} , \mathbb{Z} , \mathbb{N}_0 , \mathbb{R} , \mathbb{R}_+ , \mathbb{R}_- bzw. \mathbb{C} bezeichnen wir die natürlichen, ganzen, nichtnegativen ganzen, reellen, positiven reellen, negativen reellen bzw. komplexen Zahlen. Matrizen und Vektoren sind in großen bzw. kleinen fetten Buchstaben gesetzt. In dem Vektorraum \mathbb{C}^N , $N \in \mathbb{N}$, benutzen wir für zwei Vektoren $\mathbf{a} := (a_0, \dots, a_{N-1})^T$, $\mathbf{b} := (b_0, \dots, b_{N-1})^T \in \mathbb{C}^N$ das Standardskalarprodukt und die dadurch induzierte Norm

$$\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle := \sum_{k=0}^{N-1} a_k \overline{b_k}, \quad \|\mathbf{a}\|_2 := \sqrt{\langle \mathbf{a}, \mathbf{a} \rangle},$$

sowie die 1-Norm

$$\|\mathbf{a}\|_1 := \sum_{i=0}^{N-1} |a_i|.$$

Dabei werden wir den Euklidischen Raum \mathbb{R}^N einfach als Unterraum des \mathbb{C}^N auffassen. Die N -dimensionalen reellen und komplexen Sphären definieren wir durch

$$\begin{aligned} \mathbb{S}^N &:= \{ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^{N+1} \mid \|\mathbf{x}\|_2 = 1 \}, \\ \mathbb{B}^N &:= \{ \mathbf{z} \in \mathbb{C}^{N+1} \mid \|\mathbf{z}\|_2 = 1 \}. \end{aligned}$$

Für eine Matrix $\mathbf{A} = (a_{i,j})_{i=0, \dots, M-1; j=0, \dots, N-1} \in \mathbb{C}^{M \times N}$, $M \in \mathbb{N}$, verwenden wir die Schreibweise \mathbf{A}^T für die transponierte und $\mathbf{A}^H = \overline{\mathbf{A}}^T$ für die adjungierte Matrix. Des Weiteren bezeichnen wir mit

$$\|\mathbf{A}\|_F := \left(\sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} |a_{i,j}|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

die Frobenius-Norm und mit

$$\text{Spur}(\mathbf{A}) := \sum_{i=0}^{M-1} a_{i,i}$$

die Spur der Matrix \mathbf{A} . Schließlich definieren wir noch für eine Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ mit Eigenwerten $|\lambda_1(\mathbf{A})| \leq |\lambda_2(\mathbf{A})| \leq \dots \leq |\lambda_M(\mathbf{A})|$ die Konditionszahl

$$\kappa(\mathbf{A}) := \begin{cases} \frac{|\lambda_M(\mathbf{A})|}{|\lambda_1(\mathbf{A})|} & \text{für } |\lambda_1(\mathbf{A})| > 0, \\ \infty & \text{für } |\lambda_1(\mathbf{A})| = 0. \end{cases}$$

Zudem werden wir neben der Landau-Notation \mathcal{O} unter anderem die folgenden Standardbezeichnungen verwenden.

$\chi_X(x) := \begin{cases} 1 & \text{für } x \in X, \\ 0 & \text{für } x \notin X \end{cases}$	Charakteristische Funktion
$\text{sign}(x) := \begin{cases} 1 & \text{für } x \in \mathbb{R}_+, \\ 0 & \text{für } x = 0, \\ -1 & \text{für } x \in \mathbb{R}_- \end{cases}$	Signum-Funktion
$\delta_{n,m} := \begin{cases} 1 & \text{für } n = m, \\ 0 & \text{für } n \neq m \end{cases}$	Kronecker-Symbol
$(x)_+^\beta := \begin{cases} 0 & \text{für } x \leq 0, \\ x^\beta & \text{für } x > 0, \end{cases}$ und $\beta \in \mathbb{R}$	Abgeschnittene Potenzfunktion
$\lfloor x \rfloor := \max_{k \in \mathbb{Z}; k \leq x} k$	Gauß-Klammer
$\zeta(s) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s}$ für $1 < s \in \mathbb{R}$	Zetafunktion
$\ g\ _{1,N} := \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=-n}^n g(\frac{k}{N}) $ für $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $N \in \mathbb{N}$	Diskrete Seminorm

2.2 Funktionenräume

In diesem Abschnitt werden grundlegende Räume von Funktionen eingeführt, auf die wir in den folgenden Abschnitten zurückgreifen werden. Dabei werden mit $\mathbb{K} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$ die Räume reell- und komplexwertige Funktionen gleichermaßen betrachtet und in deren Bezeichnung nicht explizit unterschieden. An den entsprechenden Stellen wird sich die zugrunde liegende Bildmenge aus dem Kontext erschließen. Des Weiteren wird, wenn nicht anders angegeben, mit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$, eine messbare Teilmenge des n -dimensionalen Euklidischen Raums bezeichnet. Mit

$$\mathcal{C}(\Omega) := \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{K} \mid f \text{ ist stetig auf } \Omega\}$$

bezeichnen wir den Raum der stetigen Funktionen auf Ω . Für $m \in \mathbb{N}$ ist dann

$$\mathcal{C}^m(\Omega) := \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{K} \mid f^{(m)} \in \mathcal{C}(\Omega) \right\}$$

der Raum der m -fach stetig differenzierbaren Funktionen auf Ω . Der Vollständigkeit halber setzen wir noch $\mathcal{C}^0(\Omega) := \mathcal{C}(\Omega)$. Mit $m \in \mathbb{N}_0$ und einer beschränkten Teilmenge Ω des \mathbb{R}^n verwenden wir den Raum der m -mal stetig differenzierbaren Funktionen auf \mathbb{R}^n mit Träger in Ω mit der üblichen Bezeichnung

$$\mathcal{C}_0^m(\Omega) := \{f \in \mathcal{C}^m(\mathbb{R}^n) \mid \text{supp } f \subset \overline{\Omega}\}.$$

Weiterhin sei $I = [a, b] \subset \mathbb{R}$ ein kompaktes Intervall, dann definieren wir die totale Variation einer Funktion $f : I \rightarrow \mathbb{R}$ durch

$$|f|_V := \sup_{\substack{\{x_1, \dots, x_n\} \subset I, \\ x_i < x_{i+1}}} \sum_{i=1}^{n-1} |f(x_{i+1}) - f(x_i)|$$

und bezeichnen mit

$$\mathcal{BV}(I) := \{f : I \rightarrow \mathbb{R} \mid |f|_V < \infty\}$$

den Raum der Funktionen mit beschränkter totaler Variation (und kompaktem Träger). Des Weiteren sind für $1 \leq p \leq \infty$ durch

$$\|g\|_p := \begin{cases} \left(\int_a^b |g(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}} & \text{für } 1 \leq p < \infty, \\ \sup_{x \in I} |g(x)| & \text{für } p = \infty \end{cases}$$

zusätzliche Seminormen für $g \in \mathcal{BV}(I)$ gegeben. Für $m \in \mathbb{N}$ wird dessen Teilraum durch

$$\mathcal{BV}_0^m(I) := \left\{ f \in \mathcal{C}_0^{m-1}(I) \mid \text{es existiert ein } f^{(m)} \in \mathcal{BV}(I) \text{ mit} \right. \\ \left. f^{(m-1)}(x) = \int_a^x f^{(m)}(t) dt \text{ und } f^{(m)}(a) = f^{(m)}(b) = 0 \right\},$$

dem Raum der Funktionen, deren m -te Ableitung von beschränkter totaler Variation ist, definiert. Für $g \in \mathcal{BV}_0^m(I)$ liefert die Forderung $g^{(m)}(a) = g^{(m)}(b) = 0$ eigentlich keine zusätzliche Information für g , wir wollen jedoch bei der Berechnung der totalen Variation $|g^{(m)}|_V$ sicherstellen, dass nur Funktionen $g^{(m)}$ benutzt werden, die diesen Randbedingungen genügen. Wie im Fall des Raumes $\mathcal{BV}_0^m(I)$ bereits geschehen, werden wir in der weiteren Arbeit für univariate reellwertige Funktionen mit einem erweiterten Ableitungsbegriff arbeiten. Sei $g \in \mathcal{C}^{m-1}(\mathbb{R})$ mit $m \in \mathbb{N}$ eine Funktion deren $(m-1)$ -te Ableitung durch eine absolut Riemann-integrierbare Funktion $g^{(m)} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ mit Hilfe der Gleichung

$$g^{(m-1)}(x) = \int_0^x g^{(m)}(t) dt + g^{(m-1)}(0) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, \quad (2.1)$$

darstellbar ist, dann verstehen wir unter der Funktion $g^{(m)}$ eine m -te verallgemeinerte Ableitung der Funktion g . Abschließend definieren wir mit

$$\Pi_N(\mathbb{R}) := \left\{ p : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \mid p(x) = \sum_{k=0}^N a_k x^k; a_0, \dots, a_N \in \mathbb{R} \right\} \quad \text{bzw.} \\ \Pi_N(\mathbb{T}) := \left\{ r : [0, 1) \rightarrow \mathbb{C} \mid r(x) = \sum_{k=-N}^N a_k e^{2\pi i k x}; a_{-N}, \dots, a_N \in \mathbb{C} \right\},$$

den Raum der reellen algebraischen Polynome bzw. den Raum der trigonometrischen Polynome vom Grad kleiner gleich $N \in \mathbb{N}_0$.

2.3 Chebyshev-Polynome

Die Chebyshev-Polynome spielen mit ihren Eigenschaften eine besondere Rolle in der Approximationstheorie. Da sie uns auch in dieser Arbeit an verschiedenen Stellen begegnen werden, stellen wir in diesem Abschnitt alle benötigten Eigenschaften vor. Für $n \in \mathbb{N}_0$ sind die Chebyshev-Polynome $T_n : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ erster Art durch

$$T_n(x) := \cos(n \arccos(x)) \quad \text{für } x \in [-1, 1], \quad (2.2)$$

und die Chebyshev-Polynome $U_n : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ zweiter Art durch

$$U_n(x) := \begin{cases} \frac{\sin((n+1) \arccos(x))}{\sin(\arccos(x))} & \text{für } x \in (-1, 1), \\ n+1 & \text{für } x = 1, \\ (-1)^n(n+1) & \text{für } x = -1 \end{cases} \quad (2.3)$$

definiert. Mit Hilfe des Additionstheorems $(\sin \alpha - \sin \beta) = 2 \cos \frac{\alpha+\beta}{2} \sin \frac{\alpha-\beta}{2}$ erhalten wir für $k \in \mathbb{N}$ und $x \in (-1, 1)$ die Beziehung

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} (U_{2k}(x) - U_{2k-2}(x)) &= \frac{\sin((2k+1) \arccos(x)) - \sin((2k-1) \arccos(x))}{2 \sin(\arccos(x))} \\ &= \cos(2k \arccos x) = T_{2k}(x) \end{aligned}$$

und damit aufgrund der Stetigkeit die Beziehungen

$$T_{2k} = \frac{1}{2} (U_{2k} - U_{2(k-1)}) \quad \text{und} \quad T_0 = U_0. \quad (2.4)$$

Aus den beiden letzten Gleichungen ergibt sich dann leicht mittels vollständiger Induktion die Darstellung

$$U_{2k} = \sum_{l=0}^k (2 - \delta_{0,l}) T_{2l} \quad (2.5)$$

der Chebyshev-Polynome U_{2k} zweiter Art aus den Chebyshev-Polynomen T_{2k} erster Art. Später werden wir noch eine obere Schranke für die Ableitung der Chebyshev-Polynome T_n erster Art benötigen. Für die mit Hilfe des Additionstheorems $\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha) \cos(\beta) + \sin(\beta) \cos(\alpha)$ mittels vollständiger Induktion leicht einzusehende Ungleichung $|\sin(nt)| \leq n |\sin(t)|$ für $t \in (0, \pi)$ und der Ableitung

$$|T'_n(x)| = n \left| \frac{\sin(n \arccos x)}{\sqrt{1-x^2}} \right| \quad \text{mit } x \in (-1, 1)$$

folgt für $x := \cos(t)$ die Abschätzung

$$|T'_n(x)| = n \left| \frac{\sin(nt)}{\sin(t)} \right| \leq n^2 \quad (2.6)$$

aus Stetigkeitsgründen sogar für alle $x \in [-1, 1]$. Auf analoge Weise erhalten wir die Ungleichung

$$|U_n(x)| \leq (n+1) \quad \text{für alle } x \in [-1, 1]. \quad (2.7)$$

Das nächste Lemma bereitet uns auf den Beweis einer bemerkenswerten Eigenschaft der Chebyshev-Polynome vor.

Lemma 2.1. Für $m, l, r \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq m \leq l+1 \leq r+1$ gilt die Beziehung

$$\sum_{k=1}^r \left(e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} \right)^k = \begin{cases} r & \text{für } r = l \text{ und } m \in \{0, r+1\}, \\ -1 & \text{für } r = l \text{ und } m \notin \{0, r+1\}, \\ -1 & \text{für } 2|r-l \text{ und } l < r, \\ \frac{1+e^{\pi i \frac{2m-l-1}{r+1}}}{1-e^{\pi i \frac{2m-l-1}{r+1}}} & \text{für } 2 \nmid r-l. \end{cases}$$

Beweis. Zunächst gilt

$$e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} = 1 \Leftrightarrow 2m+r-l = 2n(r+1) \quad \text{für ein } n \in \mathbb{Z}.$$

Für die rechte Seite ist $n \in \{0, 1\}$, weil mit den Voraussetzungen $0 \leq m \leq l+1 \leq r+1$ die Ungleichungskette

$$\begin{aligned} 0 &\leq 0+r-l \leq 2m+r-l \\ &= 2n(r+1) \\ &= 2m+r-l \leq 2(l+1)+r-l \leq 2r+2, \end{aligned}$$

erfüllt sein muss. Für $n = 0$ folgt wegen $0 \leq 2m = l - r \leq 0$ das $m = 0$ und damit $l = r$ ist. Während für $n = 1$ wegen $2l + 2 \geq 2m = r + l + 2 \geq 2l + 2$ folgt das $m = l + 1$ und damit wieder $l = r$ gilt. Die anderen Fälle erhalten wir mit der geometrischen Reihe

$$\sum_{k=1}^r \left(e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} \right)^k = \frac{e^{\pi i(2m+r-l)} - e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}}}{e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} - 1}.$$

□

Die folgende interessante Orthogonalitätseigenschaft der Chebyshev-Polynome U_n zweiter Art können wir dem Buch [3, Kapitel 6] entnehmen. Da diese Eigenschaft jedoch nur ohne weitere Bemerkung erwähnt wird, werden wir hier einen elementaren Beweis vorstellen.

Satz 2.2. Sei für $r \in \mathbb{N}$ das Chebyshev-Polynom U_r zweiter Art gegeben, dann gilt für Polynome $p \in \Pi_{r-1}(\mathbb{R})$ die Orthogonalitätsbeziehung

$$\int_{-1}^1 p(t) \operatorname{sign}(U_r(t)) dt = 0 \quad (2.8)$$

sowie die Aussage

$$\int_{-1}^1 t^r \operatorname{sign}(U_r(t)) dt = \frac{1}{2^{r-1}}. \quad (2.9)$$

Beweis. Aufgrund der Linearität des Integrals reicht es die Aussage (2.8) für alle Monome $(\cdot)^l \in \Pi_{r-1}(\mathbb{R})$ mit $r - 1 \geq l \in \mathbb{N}_0$ zu zeigen. Da die Nullstellen des Chebyshev-Polynoms U_r zweiter Art an den Punkten $\cos\left(\frac{k\pi}{r+1}\right)$ für $k = 1, \dots, r$ liegen und die Beziehung $U_r(1) = r + 1 = (-1)^r U_r(-1)$ gilt, ist die Aussage (2.8) äquivalent zu der Gleichung

$$\int_{-1}^1 t^l \sum_{k=0}^r (-1)^k \chi_{\left(\cos \frac{k+1}{r+1} \pi, \cos \frac{k}{r+1} \pi\right)}(t) dt = 0 \quad \text{für alle } 0 \leq l \leq r - 1.$$

Da sich die Symmetrie, gerade oder ungerade, der Chebyshev-Polynome U_r auf die Symmetrie der Funktion $\operatorname{sign}(U_r)$ überträgt, gilt für die Monome $(\cdot)^l$ mit entgegengesetzter Symmetrie, d.h. $2 \nmid r - l$, die Behauptung (2.8) trivialerweise, da dann die durch Multiplikation entstehende Funktion $(\cdot)^l \operatorname{sign}(U_r)$ ungerade ist. Die Beziehung (2.8) lässt sich mit der letzten Gleichung schreiben als

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 t^l \operatorname{sign}(U_r(t)) dt &= \frac{1}{l+1} \sum_{k=0}^r (-1)^k \left(\cos^{l+1} \frac{k}{r+1} \pi - \cos^{l+1} \frac{k+1}{r+1} \pi \right) \\ &= \frac{1}{l+1} \left(1 + (-1)^{r-l} + 2 \sum_{k=1}^r (-1)^k \cos^{l+1} \frac{k}{r+1} \pi \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Für die Summe in (2.10) gilt dann

$$\begin{aligned}
\sum_{k=1}^r (-1)^k \cos^{l+1} \frac{k}{r+1} \pi &= \sum_{k=1}^r (-1)^k \frac{1}{2^{l+1}} \left(e^{\pi i \frac{k}{r+1}} + e^{-\pi i \frac{k}{r+1}} \right)^{l+1} \\
&= \sum_{k=1}^r (-1)^k \frac{1}{2^{l+1}} \sum_{m=0}^{l+1} \binom{l+1}{m} e^{\pi i \frac{k}{r+1} (2m-l-1)} \\
&= \frac{1}{2^{l+1}} \sum_{m=0}^{l+1} \binom{l+1}{m} \sum_{k=1}^r (-1)^k \left(e^{\pi i \frac{2m-l-1}{r+1}} \right)^k \\
&= \frac{1}{2^{l+1}} \sum_{m=0}^{l+1} \binom{l+1}{m} \sum_{k=1}^r \left(e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} \right)^k.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Mit Lemma 2.1 ergibt das für $l \leq r-1$ mit $2|r-l$, sowie der Gleichungen (2.10) und (2.11) die folgende Beziehung

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 t^l \operatorname{sign}(U_r(t)) dt &= \frac{1}{l+1} \left(1 + (-1)^{r-l} + 2 \sum_{k=1}^r (-1)^k \cos^{l+1} \frac{k}{r+1} \pi \right) \\
&= \frac{1}{l+1} \left(2 + \frac{1}{2^l} \sum_{m=0}^{l+1} \binom{l+1}{m} \sum_{k=1}^r \left(e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} \right)^k \right) = \frac{1}{l+1} \left(2 - \frac{2^{l+1}}{2^l} \right) = 0
\end{aligned}$$

und damit die Behauptung (2.8). Für $l=r$ erhalten wir mit Lemma 2.1 mit den Gleichungen (2.10) und (2.11) die Beziehung

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 t^l \operatorname{sign}(U_r(t)) dt &= \frac{1}{l+1} \left(1 + (-1)^0 + 2 \sum_{k=1}^r (-1)^k \cos^{l+1} \frac{k}{r+1} \pi \right) \\
&= \frac{1}{l+1} \left(2 + \frac{1}{2^l} \left(2r + \sum_{m=1}^l \binom{l+1}{m} \sum_{k=1}^r \left(e^{\pi i \frac{2m+r-l}{r+1}} \right)^k \right) \right) \\
&= \frac{1}{l+1} \left(2 + \frac{1}{2^l} (2r - 2^{l+1} + 2) \right) = \frac{1}{l+1} \left(\frac{r+1}{2^{l-1}} \right) = \frac{1}{2^{l-1}},
\end{aligned}$$

aus welcher die Gleichung (2.9) folgt. \square

2.4 Polynomiale Splines

Hier werden wir nun einen wichtigen Funktionenraum vorstellen, den wir bei der Konstruktion spezieller trigonometrischer Polynome benötigen. Dabei werden wir insbesondere die praktische Darstellung dieser Funktionen aus Lemma 2.3 nutzen. Zunächst sei im Folgendem $\beta \in \mathbb{N}$ sowie ein kompaktes Intervall $I = [a, b]$ gegeben. Dann definieren wir für Punkte $a = x_1 < x_2 < \dots < x_m = b$, $m \in \mathbb{N}$, den Raum

$$\mathcal{S}_0^\beta(I, [x_1, \dots, x_m]) := \left\{ g \in \mathcal{BV}_0^\beta(I) \mid g|_{(x_l, x_{l+1})} = h_l|_{(x_l, x_{l+1})} \text{ mit} \right. \\
\left. h_l \in \Pi_\beta(\mathbb{R}) \text{ für } l = 1, \dots, m-1 \right\} \tag{2.12}$$

der Splines vom Grad β mit den Knoten x_l , $l = 1, \dots, m$ (und kompaktem Träger). Zusätzlich definieren wir für $g \in \mathcal{S}_0^\beta(I, [x_1, \dots, x_m])$ zu jedem Knoten x_l mit $l = 1, \dots, m$ über die

entsprechenden Polynome h_l und den Polynomen $h_0 = h_m \equiv 0$ die Sprunghöhe

$$\sigma_g(x_l) := h_l^{(\beta)}(x_l) - h_{l-1}^{(\beta)}(x_l) = h_l^{(\beta)}(0) - h_{l-1}^{(\beta)}(0).$$

Lemma 2.3. Seien für $m \in \mathbb{N}$ und ein kompaktes Intervall $I = [a, b]$ die Knoten $a = x_1 < x_2 < \dots < x_m = b \in I$ gegeben. Für $g \in \mathcal{S}_0^\beta(I, [x_1, \dots, x_m])$ mit $m, \beta \in \mathbb{N}$ lässt sich für $\beta' \in \mathbb{N}_0$ und $0 \leq \beta' \leq \beta$ die β' -te (verallgemeinerte) Ableitung $g^{(\beta')}$ (vgl. (2.1)) durch

$$g^{(\beta')}(x) = \frac{1}{(\beta - \beta')!} \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) (x - x_l)_+^{\beta - \beta'} \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R} \quad (2.13)$$

darstellen.

Beweis. Die β -te Ableitung eines Polynoms vom Grad β ist eine Konstante. Dann folgt mit $\sigma_g(x_l) = h_l^{(\beta)}(0) - h_{l-1}^{(\beta)}(0)$, $l = 1, \dots, m$, die Behauptung (2.13) für $\beta' = \beta$ mit der verallgemeinerten Ableitung $g^{(\beta)}$ durch

$$g^{(\beta)}(x) = \sum_{l=1}^{m-1} h_l^{(\beta)}(0) \chi_{(x_l, x_{l+1}]}(x) = \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) \chi_{(x_l, \infty)}(x) = \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) (x - x_l)_+^0 \quad \text{für alle } x \in \mathbb{R}.$$

Für $\beta' \in \mathbb{N}_0$ gilt mit der verallgemeinerten Ableitung die Beziehung $((\cdot)_+^{\beta'})^{(\beta')} = \beta'! (\cdot)_+^0$, mit der man die Gleichung (2.13) für $0 \leq \beta' < \beta$ durch Integration sowie der Bedingung $g^{(\beta')}(a) = 0$ erhält. \square

Zu bemerken ist, dass die Darstellung (2.13) der β -ten verallgemeinerten Ableitung $g^{(\beta)}$ für die Stelle x_m den Wert $g^{(\beta)}(x_m) = h_l^{(\beta)}(0)$ annimmt, und damit im Allgemeinen nicht der Konvention des Raumes $\mathcal{BV}_0^\beta(I)$ entspricht. Denn in diesem Raum wird $g^\beta(x_m) = 0$ gefordert, falls x_m der rechte Randpunkt des Intervalls I ist. Die Darstellung (2.13) der verallgemeinerten Ableitung $g^{(\beta)}$ dürfen wir dann an den entsprechenden Stellen, für die $g \in \mathcal{BV}_0^\beta(I)$ vorausgesetzt wird, zur Bestimmung der totalen Variation $|g^{(\beta)}|_V$ nicht benutzen.

Schließlich definieren wir noch den Raum der Splines vom Grad β mit kompaktem Träger I durch

$$\mathcal{S}_0^\beta(I) := \bigcup_{m \in \mathbb{N}: a=x_1 < \dots < x_m=b \in I} \mathcal{S}_0^\beta(I, [x_1, \dots, x_m]),$$

und nennen eine Funktion g aus diesem Raum nur noch Spline vom Grad β (mit kompaktem Träger).

2.5 Rotationsgruppe

Im Folgenden geben wir einen kurzen Abriss über grundlegende Aussagen zur Analysis auf der Rotationsgruppe. Für weiterführende Informationen und Beweise verweisen wir auf [36, 35, 32, 16]. Mit $\mathcal{SO}(3) := \{\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{3 \times 3} \mid \mathbf{G}^T \mathbf{G} = \mathbf{I}; \det \mathbf{G} = 1\}$ bezeichnen wir die spezielle orthogonale Gruppe des drei-dimensionalen Euklidischen Raums. Da jede Rotation im drei-dimensionalen Euklidischen Raum durch genau eine Matrix $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ dargestellt werden kann, nennen wir $\mathcal{SO}(3)$ auch Rotationsgruppe. Die Gruppenoperation ist dabei die Hintereinanderausführung bzw. die Matrixmultiplikation \mathbf{GH} zweier Rotationen $\mathbf{G}, \mathbf{H} \in \mathcal{SO}(3)$ und das neutrale Element die Einheitsmatrix \mathbf{I} .

Für Rotationen $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ gibt es neben der eingeführten Matrixdarstellung noch viele weitere Darstellungsmöglichkeiten. Die natürlichste dabei ist die Achse-Rotationswinkel Darstellung. Rotationen \mathbf{G} lassen sich dabei mit Hilfe einer Rotationsachse $\mathbf{r} = (x, y, z)^T \in \mathbb{S}^2$ und eines Rotationswinkels $\omega \in [0, \pi]$ durch die Matrix $\mathbf{R} : \mathbb{S}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{SO}(3)$,

$$\mathbf{R}(\mathbf{r}, \omega) := (1 - \cos(\omega))\mathbf{r}\mathbf{r}^T + \begin{pmatrix} \cos(\omega) & z \sin(\omega) & -y \sin(\omega) \\ -z \sin(\omega) & \cos(\omega) & x \sin(\omega) \\ y \sin(\omega) & -x \sin(\omega) & \cos(\omega) \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

darstellen. Für $\omega \in (0, \pi)$ ist diese eindeutig. Ist $\omega = \pi$, so ist die Darstellung bis auf $\pm \mathbf{r}$ eindeutig. Des Weiteren gilt für den Rotationswinkel $\omega(\mathbf{G}) \in [0, \pi]$ der Rotation \mathbf{G} die Beziehung

$$\text{Spur } \mathbf{G} = 1 + 2 \cos(\omega(\mathbf{G})). \quad (2.15)$$

Stimmen bei zwei Rotationen $\mathbf{G}, \mathbf{H} \in \mathcal{SO}(3)$ die Rotationswinkel $\omega(\mathbf{G}), \omega(\mathbf{H})$ überein, so nennen wir diese Rotationen konjugiert zueinander (kurz: konjugiert).

Eine weitere wichtige Darstellung erhalten wir mit Hilfe der Rotation

$$\mathbf{R}_z : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{SO}(3), \quad \mathbf{R}_z(\omega) := \mathbf{R}(\mathbf{e}_z, \omega) = \begin{pmatrix} \cos(\omega) & \sin(\omega) & 0 \\ -\sin(\omega) & \cos(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

mit Rotationsachse $\mathbf{e}_z := (0, 0, 1)^T \in \mathbb{S}^2$ und der Rotation

$$\mathbf{R}_y : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{SO}(3), \quad \mathbf{R}_y(\omega) := \mathbf{R}(\mathbf{e}_y, \omega) = \begin{pmatrix} \cos(\omega) & 0 & -\sin(\omega) \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin(\omega) & 0 & \cos(\omega) \end{pmatrix}$$

mit Rotationsachse $\mathbf{e}_y := (0, 1, 0)^T \in \mathbb{S}^2$. Damit können wir jede Rotation \mathbf{G} mittels der Euler-Winkel $(\varphi, \theta, \psi) \in [0, 2\pi) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi)$ durch

$$\mathbf{G} = \mathbf{R}_z(\varphi)\mathbf{R}_y(\theta)\mathbf{R}_z(\psi) \quad (2.16)$$

darstellen. Für $\theta \in (0, \pi)$ ist diese Darstellung eindeutig. Ist $\cos(\theta) = \pm 1$, so ist sie bis auf $(\varphi \pm \psi)$ eindeutig.

Auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ lässt sich auf natürliche Weise mittels der Beziehung (2.15) eine rotationsinvariante Metrik

$$d : \mathcal{SO}(3) \times \mathcal{SO}(3) \rightarrow [0, \pi], \quad d(\mathbf{G}, \mathbf{H}) := \omega(\mathbf{H}^{-1}\mathbf{G}) \quad (2.17)$$

definieren. Rotationsinvariant bedeutet, dass für beliebige Rotationen $\mathbf{G}, \mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ die Beziehung

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = d(\mathbf{G}\mathbf{H}_1, \mathbf{G}\mathbf{H}_2)$$

erfüllt ist. Des Weiteren werden wir für messbare Funktionen $f : \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{C}$ das rotationsinvariante Haar-Maß μ , in Euler-Winkel Darstellung, mit der Definition

$$\int_{\mathcal{SO}(3)} f(\mathbf{G}) d\mu(\mathbf{G}) := \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} f(\varphi, \theta, \psi) \sin(\theta) d\psi d\theta d\varphi$$

verwenden. Falls die betrachtete Funktion $f : \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{C}$ nur vom Rotationswinkel $\omega = \omega(\mathbf{G})$ abhängt, so nennen wir diese zentral und das Haar-Maß vereinfacht sich zu

$$\int_{\mathcal{SO}(3)} f(\mathbf{G}) d\mu(\mathbf{G}) = \int_0^\pi \tilde{f}(\omega) \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) d\omega \quad (2.18)$$

mit $f(\mathbf{G}) = \tilde{f}(\omega(\mathbf{G}))$ für $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$.

Betrachten wir nun mit $\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3)) := \left\{ f : \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{C} \mid \int_{\mathcal{SO}(3)} |f|^2 d\mu < \infty \right\}$ den Raum der quadratintegrierbaren Funktionen auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ bzgl. des Haar-Maßes μ , so wird dieser mit dem Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))} := \int_{\mathcal{SO}(3)} f(\mathbf{G}) \overline{g(\mathbf{G})} d\mu(\mathbf{G}) \quad \text{für } f, g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$$

zu einem Hilbert-Raum. Eine Orthogonalbasis des Hilbert-Raums $\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$ bilden die Wigner-D-Funktionen $D_l^{k,k'} : \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{C}$ vom Grad $l \in \mathbb{N}_0$ und Ordnung $k, k' = -l, \dots, l$. Diese definieren wir wie in [16, Definition 2.10] punktweise für jedes $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ durch

$$D_l^{k,k'}(\mathbf{G}) := \int_{\mathbb{S}^2} Y_l^{k'}(\mathbf{G}^{-1}\boldsymbol{\xi}) \overline{Y_l^k(\boldsymbol{\xi})} d\mu_{\mathbb{S}^2}(\boldsymbol{\xi}) \quad \text{für } l \in \mathbb{N}_0, k, k' = -l, \dots, l$$

mit $\int_{\mathbb{S}^2} d\mu_{\mathbb{S}^2}(\boldsymbol{\xi}) = 4\pi$ und den orthonormalen Kugelflächenfunktionen Y_l^k vom Grad $l \in \mathbb{N}_0$ und Ordnung $k = -l, \dots, l$ (vgl. [25]). Damit existiert nun für jedes $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$ die eindeutige $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung

$$f = \sum_{l \in \mathbb{N}_0} \sum_{k, k' = -l}^l \hat{f}_l^{k,k'} D_l^{k,k'} \quad (2.19)$$

mit den $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten

$$\hat{f}_l^{k,k'} = (2l+1) \left\langle f, D_l^{k,k'} \right\rangle_{\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))} = (2l+1) \int_{\mathcal{SO}(3)} f(\mathbf{G}) \overline{D_l^{k,k'}(\mathbf{G})} d\mu(\mathbf{G})$$

für $l \in \mathbb{N}_0$, $k = -l, \dots, l$, und es gilt für diese Wahl der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten die Parsevalsche Gleichung

$$\|f\|_{\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))}^2 = \sum_{l \in \mathbb{N}_0} \sum_{k, k' = -l}^l \frac{|\hat{f}_l^{k,k'}|^2}{2l+1}. \quad (2.20)$$

Eine weitere bemerkenswerte Eigenschaft der Wigner-D-Funktionen ist für $l \in \mathbb{N}_0$ das Additionstheorem

$$\sum_{k, k' = -l}^l D_l^{k,k'}(\mathbf{G}) \overline{D_l^{k,k'}(\mathbf{H})} = U_{2l} \left(\frac{d(\mathbf{G}, \mathbf{H})}{2} \right) \quad (2.21)$$

mit den Chebyshev Polynomen U_{2l} zweiter Art.

Für Funktionen $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$ mit einer endlichen $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung führen wir noch den Polynomraum

$$\Pi_N(\mathcal{SO}(3)) := \left\{ f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3)) \mid f = \sum_{(l,k,k') \in J_N} \hat{f}_l^{k,k'} D_l^{k,k'}; \hat{f}_l^{k,k'} \in \mathbb{C} \text{ für } (l,k,k') \in J_N \right\} \quad (2.22)$$

mit der Indexmenge $J_N := \{(l, k, k') \mid l = 0, \dots, N; k, k' = -l, \dots, l\}$, $N \in \mathbb{N}_0$, ein. Dieser Raum hat die Dimension $d_N := \frac{1}{6}(2N+1)(2N+2)(2N+3)$.

Abschließend definieren wir für $\frac{3}{2} < s \in \mathbb{R}$ den Sobolev-Raum

$$\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3)) := \left\{ f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3)) \mid \|f\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} < \infty \right\} \quad (2.23)$$

mit dem Sobolev-Skalarprodukt

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} := \sum_{l \in \mathbb{N}_0} \sum_{k, k' = -l}^l (l+1)^{2s-1} \hat{f}_l^{k, k'} \overline{\hat{g}_l^{k, k'}} \quad \text{für } f, g \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$$

und der dadurch induzierten Sobolev-Norm

$$\|f\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} := \sqrt{\langle f, f \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}} \quad \text{für } f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3)).$$

Der so eingeführte Sobolev-Raum $\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ stimmt bis auf Normäquivalenz mit dem in [16, Definition 2.20] definierten Raum überein.

2.6 Iterative Rekonstruktion

Für die Auswertung eines Polynoms $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$, $N \in \mathbb{N}_0$, an den Punkten einer gegebenen Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$, $M \in \mathbb{N}$, stehen mit den $\mathcal{SO}(3)$ -FFTs [20, 26] auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ schnelle Algorithmen zur Verfügung. Auf diesen aufbauend sind wir nun an schnellen Algorithmen zur Lösung des inversen Problems interessiert, d.h., zu gegebenen Werten $\mathbf{y} := (y_0, \dots, y_{M-1}) \in \mathbb{C}^M$ und einer Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ wollen wir ein Polynom $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ konstruieren, welches der Bedingung

$$f(\mathbf{G}_i) = y_i$$

genügt. Es ist folglich in der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung (2.19) von f ein $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizientenvektor $\hat{\mathbf{f}} := (\hat{f}_l^{k, k'})_{(l, k, k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{d_N}$ gesucht, der Lösung des Gleichungssystems

$$\mathbf{D}\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{y}$$

mit der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} := (D_l^{k, k'}(\mathbf{G}_i))_{i=0, \dots, M-1; (l, k, k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ ist. Gilt $M = d_N$, so können wir nach dem Satz von Mairhuber-Curtis [37, Theorem 2.3] leider nicht die Invertierbarkeit der quadratischen $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix \mathbf{D} für beliebige Abtastmengen \mathcal{X} mit Kardinalität $|\mathcal{X}| = M$ sicherstellen. Deswegen untersuchen wir zum einen den unterbestimmten Interpolationsfall mit $M < d_N$ und zum anderen den überbestimmten Approximationsfall $M > d_N$. Für die Lösung der entsprechenden Gleichungssysteme ist das CG-Verfahren, siehe [15, Abschnitt 9], der iterative Löser unserer Wahl. In den folgenden Kapiteln werden wir Kriterien an die Abtastmenge \mathcal{X} erarbeiten, mit welchen wir Aussagen über die Konditionszahl der entsprechenden Systemmatrizen treffen können. Damit ist es dann auch möglich Aussagen über das Konvergenzverhalten des CG-Verfahrens, in Abhängigkeit der zugrunde liegenden Abtastmenge \mathcal{X} und des gewählten Polynomgrads N , mit Hilfe des folgenden Satzes zu machen.

Satz 2.4. Sei $\mathbf{A}^H = \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $N \in \mathbb{N}_0$, mit den Eigenwerten $0 < \lambda_1(\mathbf{A}) \leq \dots \leq \lambda_N(\mathbf{A})$ und ein Vektor $\mathbf{b} \in \mathbb{C}^N$ gegeben. Dann konvergiert das CG-Verfahrens linear gegen die Lösung $\mathbf{x}^* := \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$. Für den Fehler nach $l \in \mathbb{N}$ Schritten gilt die Abschätzung

$$\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}_l\|_2 \leq 2\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} \left(\frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right)^l \|\mathbf{x}^*\|_2$$

mit der l -ten Iterierten $\mathbf{x}_l \in \mathbb{C}^N$ und dem Startvektor $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0} \in \mathbb{C}^N$.

Beweis. Ein Beweis findet sich in [15, Satz 35.7]. □

3 Abtastmengen

Für beliebige Räume X mit Metrik $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ führen wir die Begriffe des Separationsabstandes und der Maschenweite ein. Mit diesen Begriffen können wir dann die Verteilung der Punkte, einer Abtastmenge $\mathcal{X} := \{g_0, \dots, g_{M-1}\} \subset X$ mit Kardinalität $M \in \mathbb{N}$ beschreiben. Den Separationsabstand $q_{\mathcal{X}}$ definieren wir für die Abtastmenge \mathcal{X} durch

$$q_{\mathcal{X}} := \min_{g \neq h \in \mathcal{X}} d(g, h) \quad (3.1)$$

und die Maschenweite $\delta_{\mathcal{X}}$ durch

$$\delta_{\mathcal{X}} := 2 \max_{g \in X} \min_{i=0, \dots, M-1} d(g_i, g). \quad (3.2)$$

Für $q \in \mathbb{R}_+$ nennen wir dann die Abtastmenge \mathcal{X} q -separiert, wenn $q_{\mathcal{X}} \geq q$ gilt, und δ -dicht, falls $\delta_{\mathcal{X}} \leq \delta$ für $\delta \in \mathbb{R}_+$ erfüllt ist. Zusätzlich definieren wir zu der Abtastmenge \mathcal{X} die zugehörige Voronoi-Partition

$$V_{\mathcal{X}} := \{\Omega_i \subset X \mid i = 0, \dots, M-1\} \quad (3.3)$$

mit den Voronoi-Zellen

$$\Omega_i := \left\{ g \in X \mid d(g, g_i) = \min_{k=0, \dots, M-1} d(g, g_k) \right\} \quad \text{für } i = 0, \dots, M-1. \quad (3.4)$$

Betrachten wir in einem Abschnitt verschiedene metrische Räume (X, d) , so wird aus dem Zusammenhang ersichtlich werden welcher an den entsprechenden Stellen gemeint ist. Im Folgenden setzen wir $X := \mathcal{SO}(3)$ mit der in (2.17) definierten Metrik d . Für $m \in \mathbb{N}_0$ führen wir auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ den m -ten Ring

$$R_{q,m} := \{\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3) \mid mq \leq d(\mathbf{I}, \mathbf{G}) \leq (m+1)q\}$$

der Ringpartition $R_q := \{R_{q,m}\}_{m \in \mathbb{N}}$ ein, mit welcher wir durch den m -ten Ring

$$R_{\mathcal{X},q,m} := R_{q,m} \cap \mathcal{X}, \quad (3.5)$$

einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} die Ringpartition $R_{\mathcal{X},q} := \{R_{\mathcal{X},q,m}\}_{m \in \mathbb{N}}$ einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} erhalten. Das folgenden Lemma liefert mit Hilfe eines Packungsarguments Abschätzungen über die Kardinalität q -separierter Abtastmengen \mathcal{X} der Rotationsgruppe. Das Packungsargument besagt dabei, dass die Anzahl disjunkter Teilmengen gleicher Größe einer Menge durch das Verhältnis der Größe der Menge zur Größe dieser Teilmengen nach oben beschränkt ist.

Lemma 3.1. *Sei $q \in (0, \pi]$, dann hat jede q -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ die Kardinalität*

$$M \leq \frac{109\pi}{2q^3}. \quad (3.6)$$

Zusätzlich existiert eine q -separierte Abtastmenge \mathcal{X}_q mit der Kardinalität

$$M_q \geq \frac{6\pi}{q^3}. \quad (3.7)$$

Für $m \in \mathbb{N}$ ist die Anzahl der Abtastpunkte des m -ten Ringes $R_{\mathcal{X},q,m}$ (3.5) einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} von oben durch

$$|R_{\mathcal{X},q,m}| \leq 48m^2 + 48m + 28 \quad (3.8)$$

beschränkt.

Beweis. Sei $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$, dann ist für jedes $r \in [0, \pi]$ die Kugel

$$B_r(\mathbf{G}) := \{\mathbf{H} \in \mathcal{SO}(3) : d(\mathbf{H}, \mathbf{G}) \leq r\}$$

vom Radius r um \mathbf{G} gegeben. Das Maß der Kugel $B_r(\mathbf{I})$ lässt sich durch

$$\mu(B_r(\mathbf{I})) = \frac{2}{\pi} \int_0^r \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) d\omega \leq \frac{2}{\pi} \int_0^r \left(\frac{\omega}{2}\right)^2 d\omega = \frac{r^3}{6\pi} \quad (3.9)$$

nach oben abschätzen. Außerdem erhalten wir für $r \leq \frac{\pi}{2}$ eine Abschätzung nach unten durch

$$\begin{aligned} \mu(B_r(\mathbf{I})) &= \frac{2}{\pi} \int_0^r \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) d\omega \\ &\geq \frac{2}{\pi} \int_0^r \left(\frac{\omega}{2} - \frac{\omega^3}{48}\right)^2 d\omega \\ &= \frac{2}{\pi} \left(\frac{r^3}{12} - \frac{r^5}{240} + \frac{r^7}{16128} \right) \\ &\geq \frac{2}{\pi} \frac{8}{109} r^3, \end{aligned} \quad (3.10)$$

da die Ungleichung $\left(\frac{1}{12} - \frac{8}{109}\right) - \frac{\tilde{r}^2}{240} + \frac{\tilde{r}^4}{16128} \geq 0$ für jedes $\tilde{r} \in (0, \frac{\pi}{2})$ erfüllt ist. Mit der Rotationsinvarianz des Haar-Maßes und der Abschätzung (3.10) gilt $\mu(B_{\frac{q}{2}}(\mathbf{G}_i)) = \mu(B_{\frac{q}{2}}(\mathbf{I})) \geq \frac{2}{\pi} \frac{q^3}{109}$ für jedes $\mathbf{G}_i \in \mathcal{X}$, $i = 0, \dots, M-1$. Folglich ist mit der q -Separiertheit der Abtastmenge \mathcal{X} ihre Kardinalität

$$M \leq \frac{\mu(\mathcal{SO}(3))}{\mu(B_{\frac{q}{2}}(\mathbf{I}))} \leq \frac{109\pi}{2q^3}$$

durch Anwenden des Packungsarguments beschränkt. Damit ist die Ungleichung (3.6) gezeigt.

Zum Beweisen der unteren Schranke (3.7) nehmen wir das Gegenteil an. Dazu sei $\tilde{\mathcal{X}}_q = \{\tilde{\mathbf{G}}_0, \dots, \tilde{\mathbf{G}}_{\tilde{M}-1}\}$ eine größte q -separierte Abtastmenge mit Kardinalität $\tilde{M} \in \mathbb{N}$. Da dann die Ungleichung (3.7) für keine q -separierte Abtastmenge gilt, hat $\tilde{\mathcal{X}}_q$ höchstens $\tilde{M} < \frac{6\pi}{q^3}$ viele Elemente. Diesmal bauen wir eine Kugel vom Radius q um jeden Abtastpunkt $\tilde{\mathbf{G}}_j \in \tilde{\mathcal{X}}_q$ für $j = 0, \dots, \tilde{M}-1$. Dadurch erhalten wir mit Hilfe der Abschätzung (3.9) die Beziehung

$$\mu\left(\mathcal{SO}(3) \setminus \bigcup_{j=0}^{\tilde{M}-1} B_q(\tilde{\mathbf{G}}_j)\right) \geq \mu(\mathcal{SO}(3)) - \sum_{j=0}^{\tilde{M}-1} \mu(B_q(\mathbf{I})) \geq 1 - \tilde{M} \frac{q^3}{6\pi} > 0.$$

Also existiert ein weiterer Punkt $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ so, dass $\mathcal{X}_q := \tilde{\mathcal{X}}_q \cup \{\mathbf{G}\}$ q -separiert bleibt. Dies ist jedoch ein Widerspruch zur Annahme, dass $\tilde{\mathcal{X}}_q$ eine größte q -separierte Abtastmenge ist.

Durch erneutes Anwenden des Packungsarguments erhalten wir die erste Abschätzung

$$\begin{aligned}
|R_{\mathcal{X},q,m}| &\leq \frac{\mu\left(B_{q(m+\frac{3}{2})}(\mathbf{I})\right) - \mu\left(B_{q(m-\frac{1}{2})}(\mathbf{I})\right)}{\mu\left(B_{\frac{q}{2}}(\mathbf{I})\right)} \\
&= \frac{\frac{2}{\pi} \int_{q(m-\frac{1}{2})}^{q(m+\frac{3}{2})} \sin^2 \frac{\omega}{2} d\omega}{\frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{q}{2}} \sin^2 \frac{\omega}{2} d\omega} = 4 \frac{\frac{q}{2} - \cos\left((2m+1)\frac{q}{2}\right) \cos\left(\frac{q}{2}\right) \sin\left(\frac{q}{2}\right)}{\frac{q}{2} - \sin\left(\frac{q}{2}\right)}
\end{aligned}$$

für die Anzahl der Abtastpunkte \mathbf{G}_i des m -ten Rings. Diese gilt es nun unabhängig von q nach oben zu beschränken. Zunächst erhält man durch Anwenden der Regel von L'Hospital den Grenzwert

$$\lim_{q \rightarrow 0} 4 \frac{\frac{q}{2} - \cos\left((2m+1)\frac{q}{2}\right) \cos\left(\frac{q}{2}\right) \sin\left(\frac{q}{2}\right)}{\frac{q}{2} - \sin\left(\frac{q}{2}\right)} = 48m^2 + 48m + 28,$$

welcher damit die untere Grenze für obere Schranken darstellt. Im Folgenden beweisen wir die Ungleichung

$$\frac{r - \cos(nr) \cos(r) \sin(r)}{r - \sin(r)} \leq 3n^2 + 4 \quad \text{für } r \in \left(0, \frac{\pi}{2}\right], n \in \mathbb{N}, \quad (3.11)$$

die uns mit $r = \frac{q}{2}$ und $n = 2m + 1$ die Behauptung (3.8) liefert. Dazu bedienen wir uns der Beziehung $T'_n(x) \leq n^2$ für $x \in [-1, 1]$ und $n \in \mathbb{N}$ zur Abschätzung der Ableitung des n -ten Chebyshev-Polynoms erster Art (2.6). Dann gilt für $x \in (0, 1]$ und $n \in \mathbb{N}$ die Ungleichung

$$\begin{aligned}
\frac{n^2 + 1}{2}x - \frac{n^2 - 1}{2x} - T_n(x) &= \int_x^1 T'_n(t) - \frac{n^2 + 1}{2} - \frac{n^2 - 1}{2t^2} dt \\
&\leq \int_x^1 n^2 - \frac{n^2 + 1}{2} - \frac{n^2 - 1}{2} dt \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Daraus folgt für $x \in [0, 1]$ und $n \in \mathbb{N}$ die Abschätzung

$$\sqrt{1 - x^2} \left(1 - \frac{n^2 + 1}{2}(1 - x^2) - T_n(x)x\right) \leq 0.$$

Substituieren wir nun $x = \cos(r)$ mit $r \in [0, \frac{\pi}{2}]$, so erhalten wir

$$\begin{aligned}
&\sin(r) \left(1 - \frac{n^2 + 1}{2} \sin^2(r) - \cos(nr) \cos(r)\right) \leq 0, \\
\Leftrightarrow \sin(r) \left((3n^2 + 4) - \cos(nr) \cos(r)\right) &\leq (3n^2 + 3) \left(\sin(r) + \frac{\sin^3(r)}{6}\right).
\end{aligned} \quad (3.12)$$

Durch Ausnutzung der Potenzreihe des Arkussinus

$$\arcsin(y) = y + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^{k-1} \frac{2l-1}{2l} \right) \frac{y^{2k-1}}{2k-1} \quad \text{mit } y \in [0, 1]$$

erhalten wir wegen nichtnegativer Summanden im Reihenrest die Abschätzung

$$r = \arcsin(\sin(r)) = \sin(r) + \sum_{k=2}^{\infty} \left(\prod_{l=1}^{k-1} \frac{2l-1}{2l} \right) \frac{\sin^{2k-1}(r)}{2k-1} \geq \sin(r) + \frac{\sin^3(r)}{6}.$$

Damit führt die Abschätzung (3.12) zur Ungleichung

$$\sin(r) ((3n^2 + 4) - \cos(nr) \cos(r)) \leq (3n^2 + 3)r,$$

aus welcher schließlich die Behauptung (3.11) folgt. \square

Wie wir sehen, konnten wir die Abschätzung

$$|R_{\mathcal{X},q,m}| \leq 54.5m^2 + 54.5m + 32 \leq 141m^2$$

für die Kardinalität des m -ten Ring $R_{\mathcal{X},q,m}$ einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} aus der Arbeit [11, Lemma 5.1] verbessern.

Nun werden wir Formeln zur Berechnung von Abständen zwischen Rotationen angeben, wenn diese in der Achse-Rotationswinkel oder der Euler-Winkel Darstellung gegeben sind. Damit werden wir zunächst eine bessere Vorstellung über die metrischen Eigenschaften der Rotationsgruppe erhalten, wodurch wir dann auch Konstruktionen für relativ gleichmäßig verteilte Abtastmengen ableiten können. Im Wesentlichen benutzen wir für die Herleitung dieser Formeln zur Berechnung des Abstands zweier Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ die Beziehung

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = 2 \arccos \left(\left| \frac{\sqrt{\text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1} \mathbf{H}_1) + 1}}{2} \right| \right), \quad (3.13)$$

die sich aus der Gleichung (2.17) durch

$$\text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1} \mathbf{H}_1) + 1 = 2(1 + \cos(d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2))) = 4 \cos^2 \left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2} \right) \quad (3.14)$$

ergibt.

3.1 Konstruktionen mittels der Achse-Rotationswinkel Darstellung

Im Folgendem seien zwei Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in Achse-Rotationswinkel Darstellung durch die Rotationswinkel $\omega_1, \omega_2 \in [0, \pi]$ und Rotationsachsen $\mathbf{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)^T, \mathbf{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)^T \in \mathbb{S}^2$ gegeben. Des Weiteren bezeichnen wir mit $\Delta\omega := \omega_1 - \omega_2$ die Rotationswinkeldifferenz, sowie mit dem Rotationsachsenwinkel $\alpha \in [0, \pi]$ den sphärischen Abstand zwischen beiden Rotationsachsen \mathbf{r}_1 und \mathbf{r}_2 im Euklidischen Raum \mathbb{R}^3 , d.h.

$$\alpha = d_{\mathbb{S}^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) := \arccos \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle.$$

Lemma 3.2. Für zwei Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in Achse-Rotationswinkel Darstellung ergibt sich deren Abstand durch die Formel

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = 2 \arccos \left(\left| \cos(\alpha) \sin \left(\frac{\omega_1}{2} \right) \sin \left(\frac{\omega_2}{2} \right) + \cos \left(\frac{\omega_1}{2} \right) \cos \left(\frac{\omega_2}{2} \right) \right| \right). \quad (3.15)$$

Insbesondere gilt für konjugierte Rotationen mit dem gemeinsamen Rotationswinkel ω der symmetrische Zusammenhang

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = 2 \arccos \left(\left| 1 - 2 \sin^2 \left(\frac{\alpha}{2} \right) \sin^2 \left(\frac{\omega}{2} \right) \right| \right) \quad (3.16)$$

zwischen dem Rotationsachsenwinkel α und dem Rotationswinkel ω , d.h. beim Vertauschen der Rollen beider Winkel bleibt der Abstand zugehöriger Rotationen erhalten.

Beweis. Für die Spur der Matrix $\mathbf{H}_2^{-1}\mathbf{H}_1$ erhalten wir mit der Matrixdarstellung (2.14) und der offensichtlichen Eigenschaft

$$\mathbf{H}_2^{-1} = \mathbf{R}(\mathbf{r}_2, \omega_2)^{-1} = \mathbf{R}(-\mathbf{r}_2, \omega_2)$$

die Identität

$$\begin{aligned} \text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1}\mathbf{H}_1) &= (\cos(\omega_1) - 1)(\cos(\omega_2) - 1) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle^2 + 2 \sin(\omega_1) \sin(\omega_2) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle \\ &\quad + \cos(\omega_2)(1 - \cos(\omega_1)) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1 \rangle + \cos(\omega_1)(1 - \cos(\omega_2)) \langle \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2 \rangle \\ &\quad + 3 \cos(\omega_1) \cos(\omega_2). \end{aligned}$$

Die Gleichheit erkennen wir dabei sofort nach vollständigem Ausmultiplizieren beider Seiten. Benutzen wir in der letzten Gleichung zusätzlich die Voraussetzung $\|\mathbf{r}_1\|_2 = \|\mathbf{r}_2\|_2 = 1$, so erhalten wir die Beziehung

$$\begin{aligned} \text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1}\mathbf{H}_1) &= (\cos(\omega_1) - 1)(\cos(\omega_2) - 1) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle^2 + 2 \sin(\omega_1) \sin(\omega_2) \langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle \\ &\quad + (\cos(\omega_1) + 1)(\cos(\omega_2) + 1) - 1. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Mit Hilfe der Additionstheoreme ergibt sich durch die Identität $\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \rangle = \cos(\alpha)$ der Zusammenhang

$$\text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1}\mathbf{H}_1) + 1 = 4 \left(\cos(\alpha) \sin\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega_2}{2}\right) + \cos\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega_2}{2}\right) \right)^2, \quad (3.18)$$

aus dem wir mit der Gleichung (3.13) die Behauptung (3.15) folgern können. Setzen wir $\omega = \omega_1 = \omega_2$, so erhalten wir durch Anwenden der Additionstheoreme auf die Formel (3.15) die Aussage (3.16). \square

Weitere wichtige Eigenschaften liefert das folgende Lemma.

Lemma 3.3. Für Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in der Achse-Rotationswinkel Darstellung gelten die scharfen Schranken

$$\min(\pi, \omega_1 + \omega_2) \geq d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq |\Delta\omega|, \quad (3.19)$$

wobei für $\alpha = 0$ die untere Schranke angenommen wird. Des Weiteren hängt der Abstand $d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)$ konjugierter Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2$ mit gemeinsamen Rotationswinkel $0 < \omega \leq \frac{\pi}{2}$ streng monoton steigend vom Rotationsachsenwinkel $\alpha \in [0, \pi]$ ab.

Beweis. Die Abschätzung (3.19) ist aufgrund der fallenden Monotonie des Kosinus im Intervall $[0, \pi]$ äquivalent zu der Ungleichung

$$\cos\left(\min\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\omega_1 + \omega_2}{2}\right)\right) \leq \cos\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) \leq \cos\left(\frac{|\Delta\omega|}{2}\right) = \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}\right).$$

Durch die Additionstheoreme erhalten wir mit der Gleichung (3.14) und der Beziehung (3.18) die Identität

$$\begin{aligned} &\cos^2\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\omega_1 \pm \omega_2}{2}\right) \\ &= \cos^2(\alpha) \sin^2\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\omega_2}{2}\right) + 2 \cos(\alpha) \sin\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega_2}{2}\right) \\ &\quad \pm 2 \sin\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\omega_2}{2}\right) \cos\left(\frac{\omega_2}{2}\right) - \sin^2\left(\frac{\omega_1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\omega_2}{2}\right). \end{aligned}$$

Beschränken wir uns zunächst nur auf die Werte $\tilde{\omega}_1, \tilde{\omega}_2 \in (0, \pi)$, so erhalten wir die faktorierte Variante

$$\begin{aligned} & \cos^2\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) - \cos^2\left(\frac{\tilde{\omega}_1 \pm \tilde{\omega}_2}{2}\right) \\ &= \sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right) \left(\cos(\alpha) \pm 1\right) \left(\cos(\alpha) \mp 1 + 2 \cot\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \cot\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right)\right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Da im Fall der Differenz $\tilde{\omega}_1 - \tilde{\omega}_2$ die rechte Seite der Gleichung (3.20) offensichtlich kleiner gleich Null ist, haben wir aufgrund der Stetigkeit die untere Abschätzung der Behauptung (3.19) gezeigt. Für die obere Schranke in (3.19) reicht es wegen $\pi \geq d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)$ die Aussage $\omega_1 + \omega_2 \geq d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)$ für $\omega_1 + \omega_2 \leq \pi$ zu zeigen. Mit der Forderung $\tilde{\omega}_1 + \tilde{\omega}_2 < \pi$ folgt wegen des Additionstheorems

$$\begin{aligned} 0 &< \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_1 + \tilde{\omega}_2}{2}\right) \\ &= \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right) - \sin\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right) \end{aligned}$$

die Beziehung

$$\sin\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right) < \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right)$$

und damit die Abschätzung

$$2 \cot\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \cot\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right) - 1 = 2 \frac{\cos\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \cos\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right)}{\sin\left(\frac{\tilde{\omega}_1}{2}\right) \sin\left(\frac{\tilde{\omega}_2}{2}\right)} - 1 > 1.$$

Folglich sind im Fall der Summe $\tilde{\omega}_1 + \tilde{\omega}_2$ unter der zusätzlichen Voraussetzung $\tilde{\omega}_1 + \tilde{\omega}_2 < \pi$ die Terme der rechten Seite der Gleichung (3.20) größer gleich Null, was die obere Schranke der Behauptung (3.19) beweist.

Des Weiteren wird mit $\cos\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) = \cos\left(\frac{\Delta\omega}{2}\right)$ für $\alpha = 0$ die untere Schranke der Abschätzung (3.19) angenommen. Die obere Schranke der Ungleichung (3.19) erreichen wir mit $\cos\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) = \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}\right)$ für $\alpha = \pi$ und $\omega_1 + \omega_2 \leq \pi$.

Für die letzte Aussage gelte nun $0 < \omega_1 = \omega_2 = \omega \leq \frac{\pi}{2}$. Dann folgt aufgrund der streng steigenden Monotonie des Sinus in $\omega \in [0, \frac{\pi}{2}]$ die Ungleichung

$$1 \geq 1 - 2 \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \geq 1 - \sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right) \geq 0 \quad (3.21)$$

und somit kann der Betrag in der Formel (3.16) weggelassen werden. Schließlich folgt mit der Formel (3.16) und der Monotonie des Sinus in $\alpha \in [0, \frac{\pi}{2}]$ die Behauptung. \square

Für die Konstruktion q -separierter Abtastmengen \mathcal{X} benötigen wir noch das folgende Lemma.

Lemma 3.4. Sei $q \in (0, \pi]$, so gilt für zwei konjugierte Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2$ mit gemeinsamen Rotationswinkel $\omega \in [\frac{q}{2}, \pi - \frac{q}{2}]$ die Separationseigenschaft

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq q$$

genau dann, wenn für die Rotationsachsen $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathbb{S}^2$ die Separationseigenschaft

$$d_{\mathbb{S}^2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \alpha \geq 2 \arcsin\left(\frac{\sin\left(\frac{q}{4}\right)}{\sin\left(\frac{\omega}{2}\right)}\right) \quad (3.22)$$

erfüllt ist.

Beweis. Nach Lemma 3.2 gilt für $\frac{q}{2} \leq \omega \leq \pi - \frac{q}{2}$ die Separationseigenschaft $d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq q$ genau dann, wenn die Bedingung

$$-\cos\left(\frac{q}{2}\right) \leq 1 - 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \leq \cos\left(\frac{q}{2}\right)$$

erfüllt ist. Mit der Beziehung

$$\begin{aligned} 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) &\leq 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\pi}{2} - \frac{q}{4}\right) = 2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\cos^2\left(\frac{q}{4}\right) \\ &\leq 2\cos^2\left(\frac{q}{4}\right) = 1 + \cos\left(\frac{q}{2}\right) \end{aligned}$$

ist die erste Ungleichung erfüllt, wobei Gleichheit genau bei $\omega = \pi - \frac{q}{2}$ und $\alpha = \pi$ angenommen wird. Die zweite Ungleichung erhalten wir wegen der Separationseigenschaft (3.22) an α durch die Beziehung

$$2\sin^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)\sin^2\left(\frac{\omega}{2}\right) \geq 2\sin^2\left(\frac{q}{4}\right) = 1 - \cos\left(\frac{q}{2}\right),$$

wobei Gleichheit für $\omega \in [\frac{q}{2}, \pi - \frac{q}{2}]$ nur mit $\alpha = 2\arcsin\left(\frac{\sin(\frac{q}{4})}{\sin(\frac{\omega}{2})}\right)$ angenommen wird. \square

Für eine bessere Vorstellung können wir die Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ als Kugel $K_\pi := \{\omega \mathbf{r} \mid \mathbf{r} \in \mathbb{S}^2, \omega \in [0, \pi]\} \subset \mathbb{R}^3$ mit Radius π betrachten, bei der gegenüberliegende Punkte der Kugeloberfläche $\pi\mathbb{S}^2$ miteinander identifiziert werden. Würden wir dabei die Abstandsmessung in der Metrik des Euklidischen drei-dimensionalen Raum ausführen, unter Berücksichtigung der Identifikation zweier gegenüberliegender Punkte der Kugeloberfläche, so ergäben sich ähnliche metrischen Eigenschaften wie in den Lemmata 3.3 und 3.4.

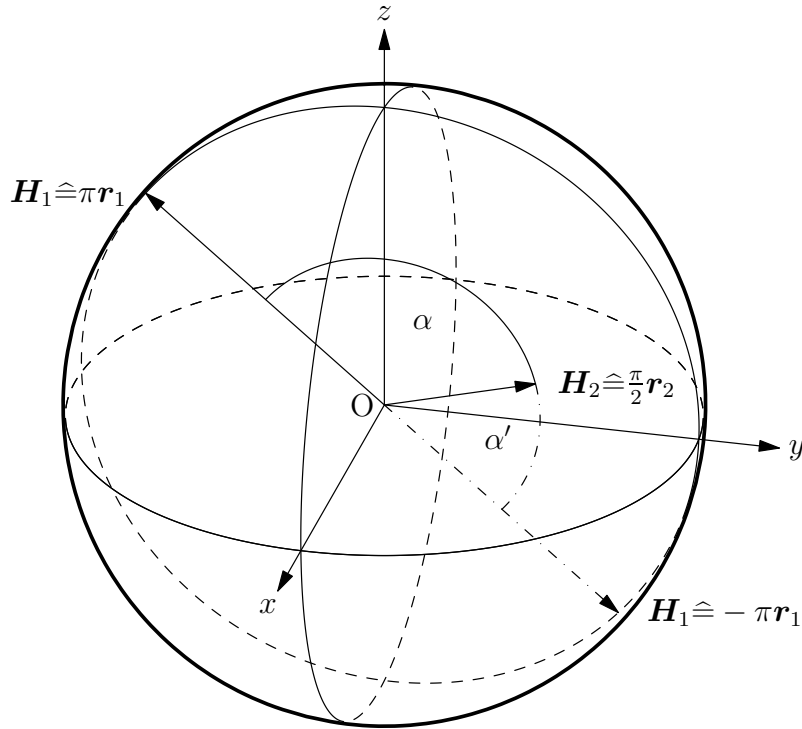


Abbildung 3.1: Visualisierung zweier Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in Achse-Rotationswinkel Darstellung.

Algorithmus 3.1

Input: Separationsabstand $q \in (0, \pi]$

Wähle $M_q \in \mathbb{N}$ maximal, sodass die Bedingungen $d_\omega := \frac{\pi}{M_q} \geq q$ erfüllt ist.

for $m = 0, \dots, M_q - 1$ **do**

Konstruiere bzgl. des sphärischen Abstands $d_{\mathbb{S}^2}$ für

$$\tilde{q}_m := 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{q}{4} \right)}{\sin \left(\left(m + \frac{1}{2} \right) \frac{d_\omega}{2} \right)} \right)$$

Abtastmengen $\tilde{\mathcal{X}}_m \subset \mathbb{S}^2$ mit Separationsabstand $\tilde{q}_{\tilde{\mathcal{X}}_m} \geq \tilde{q}_m$.

end for

Setze $\mathcal{X} := \bigcup_{m=0}^{M_q-1} \left\{ \mathbf{R} \left(\left(m + \frac{1}{2} \right) d_\omega, \mathbf{r} \right) \mid \mathbf{r} \in \tilde{\mathcal{X}}_m \right\}$.

Output: q -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$

Satz 3.5. Für $q \in (0, \pi]$ liefert der Algorithmus 3.1 eine q -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$. Werden insbesondere für $q = \frac{\pi}{M_q}$ mit $M_q \in \mathbb{N}$ bei der Konstruktion \tilde{q}_m -separierte Mengen $\tilde{\mathcal{X}}_m \subset \mathbb{S}^2$ mit der Gleichmäßigekeitsbedingung

$$\delta_{\tilde{\mathcal{X}}_m} \leq 2\tilde{q}_m \text{ für } m = 0, \dots, M_q - 1 \quad (3.23)$$

verwendet, so hat die Abtastmenge \mathcal{X} eine Maschenweite

$$\delta_{\mathcal{X}} \leq 4q.$$

Beweis. Die Aussage zur Separiertheit ergibt sich einfach aus Lemma 3.3 und Lemma 3.4. Es sei die Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ nach Algorithmus 3.1 mit $(2\tilde{q}_m)$ -dichten Mengen $\tilde{\mathcal{X}}_m \subset \mathbb{S}^2$, $m = 0, \dots, M_q - 1$, konstruiert. Dann gibt es zu einer beliebigen Rotation $\mathbf{X} \in \mathcal{SO}(3)$ eine Rotation $\mathbf{G} \in \mathcal{X}$ mit kleinsten Abstand. Diese Rotation \mathbf{G} liegt für ein $n \in \{0, \dots, M_q - 1\}$ in einer Menge $S_n := \{\mathbf{R}(\omega, \mathbf{r}) \mid \mathbf{r} \in \mathbb{S}^2\}$ mit $\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) d_\omega$. Des Weiteren sei die Rotation $\mathbf{G} := \mathbf{R}(\omega, \mathbf{r}_{\mathbf{X}})$ mit der Rotationsachse $\mathbf{r}_{\mathbf{X}}$ der Rotation \mathbf{X} gegeben, dann folgt mit Lemma 3.3 zunächst die Beziehung

$$d(\mathbf{X}, \mathbf{G}) \leq d(\mathbf{X}, \tilde{\mathbf{G}}) + d(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G}) \leq q + d(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G}). \quad (3.24)$$

Wegen der Bedingung (3.23) erhalten wir für den sphärischen Abstand zwischen den Rotationsachsen von $\tilde{\mathbf{G}}$ und \mathbf{G} die Abschätzung

$$\alpha \leq \frac{\delta_{\tilde{\mathcal{X}}_n}}{2} \leq \tilde{q}_n = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{q}{4} \right)}{\sin \left(\frac{\omega}{2} \right)} \right).$$

Nach Lemma 3.4 wissen wir aber bereits, dass damit auch $d(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G}) \leq q$ gelten muss. Folglich ergibt sich mit (3.24) die Behauptung

$$\delta_{\mathcal{X}} = 2 \max_{\mathbf{X} \in \mathcal{SO}(3)} \min_{i=0, \dots, M-1} d(\mathbf{X}, \mathbf{G}_i) \leq 2 \max_{\mathbf{X} \in \mathcal{SO}(3)} (q + q) \leq 4q.$$

□

Mit Algorithmus 3.1 haben wir die Konstruktion einer q -separierten Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ auf die Konstruktion \tilde{q} -separierter Abtastmengen auf der Sphäre \mathbb{S}^2 zurückgeführt, für welche schon viele Methoden entwickelt wurden [28],[13, Kapitel 7]. Die Gleichmäßigkeitsbedingung (3.23) einer mit diesen Methoden konstruierten \tilde{q} -separierten Menge $\tilde{\mathcal{X}}$ lässt sich relativ leicht erfüllen. Ohne Einschränkung betrachten wir eine Menge $\tilde{\mathcal{X}} = \{\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{r}_{|\tilde{\mathcal{X}}|-1}\}$ mit Kardinalität $|\tilde{\mathcal{X}}| > 2$ und der zugehörige Voronoi-Partition $V_{\tilde{\mathcal{X}}} = \{\Omega_i \mid i = 0, \dots, |\tilde{\mathcal{X}}| - 1\}$ mit den entsprechenden Voronoi-Zellen Ω_i (siehe (3.3), (3.3)). Die Voronoi-Zellen Ω_i sind folglich konvexe sphärische Polygone. Sei weiterhin $\mathbf{r} \in \mathbb{S}^2$ eine Rotationsachse, für welche die Maschenweite $\delta_{\tilde{\mathcal{X}}}$ angenommen wird, d.h., es gilt $\delta_{\tilde{\mathcal{X}}} = 2 \min_{i=0, \dots, |\tilde{\mathcal{X}}|-1} d_{\mathbb{S}^2}(\mathbf{r}, \mathbf{r}_i)$. Diese Rotationsachse \mathbf{r} liegt dann in einer Ecke einer Voronoi-Zelle $\tilde{\Omega}$. Gilt für den sphärische Abstand $\frac{\delta_{\tilde{\mathcal{X}}}}{2} = d_{\mathbb{S}^2}(\mathbf{r}, \tilde{\mathbf{r}}) \geq \tilde{q}$ zu einer nächstliegenden Rotationsachse $\tilde{\mathbf{r}} \in \tilde{\mathcal{X}}$, so können wir die Rotationsachse \mathbf{r} zur Menge $\tilde{\mathcal{X}}$ hinzufügen ohne die \tilde{q} -Separiertheit zu verletzen. Folglich können wir mit Hilfe des in [27] vorgeschlagenen Algorithmus zur Generierung einer Voronoi-Partition stets Abtastmengen \mathcal{X} konstruieren, die der Gleichmäßigkeitsbedingung (3.23) genügen.

Mit Hilfe des Lemmas 3.4 lässt sich noch für $q \in (0, \frac{2}{5}\pi]$ die Frage nach der maximalen Anzahl q -separierter Punkte, die von einem gegebenen Punkt $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ den Abstand q haben, beantworten. Diese Aufgabenstellung ist gleichbedeutend mit dem sogenannten „kissing number“-Problem [8, Kapitel 1]. Bei diesem Problem ist die maximale Anzahl von Kugeln gleichen Radius $\frac{q}{2}$ gesucht, die eine „zentrale“ Kugel mit Radius $\frac{q}{2}$ gleichzeitig berühren können. In gekrümmten Räumen, wie z.B. der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$, ist diese Anzahl natürlich abhängig vom Separationsabstand q .

Folgerung 3.6. Die „kissing number“ hat für die Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ mit $q \in (0, \frac{2}{5}\pi]$ den Wert 12.

Beweis. Ohne Einschränkung sei $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ die Einheitsmatrix \mathbf{I} . Für zwei konjugierte Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ mit Rotationswinkel $\omega = q$ erhalten wir mit Lemma 3.4 den sphärischen Separationsabstand

$$\tilde{q} = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{q}{4} \right)}{\sin \left(\frac{\omega}{2} \right)} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{\sin \left(\frac{q}{4} \right)}{2 \sin \left(\frac{\omega}{4} \right) \cos \left(\frac{\omega}{4} \right)} \right) = 2 \arcsin \left(\frac{1}{2} \cos^{-1} \left(\frac{q}{4} \right) \right) \quad (3.25)$$

der Rotationsachsen $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathbb{S}^2$. Dieser ist offensichtlich monoton fallend in q und damit stellt

$$\tilde{q}_{\min} := 2 \arcsin \left(\frac{1}{2} \cos^{-1} \left(\frac{0}{4} \right) \right) = 2 \arcsin \left(\frac{1}{2} \right) = \frac{\pi}{3}$$

die größte untere Schranke des Rotationsachsenwinkels α dar. Für \tilde{q}_{\min} wissen wir aber nach [8, Kapitel 1], dass es keine \tilde{q}_{\min} -separierte Menge $\tilde{\mathcal{X}} \subset \mathbb{S}^2$ gibt, die mehr als 12 Punkte enthält. Die Eckpunktmenge $\tilde{\mathcal{X}}_{\text{Iko}}$ des Ikosaeders erfüllt mit $\arccos \left(\frac{1}{\sqrt{5}} \right) > \tilde{q}_{\min}$ jedoch die Separationsbedingung. Für $q = \frac{2}{5}\pi$ wird der nötige Separationsabstand mit den Rotationsachsen in $\tilde{\mathcal{X}}_{\text{Iko}}$ aufgrund des minimalen Rotationswinkels von $\frac{2}{5}\pi$ und der Gruppenstruktur der Ikosaederdrehgruppe auch angenommen. \square

3.2 Eine Konstruktion mittels der Euler-Winkel Darstellung

Im Folgendem seien zwei Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in Euler-Winkel Darstellung mit den Euler-Winkeln $(\varphi_1, \theta_1, \psi_1), (\varphi_2, \theta_2, \psi_2) \in [0, 2\pi) \times [0, \pi] \times [0, 2\pi)$ gegeben. Zusätzlich definieren wir noch die entsprechenden Parameterdifferenzen $\Delta\varphi := \varphi_1 - \varphi_2$ und $\Delta\psi := \psi_1 - \psi_2$.

Lemma 3.7. Für zwei Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in \mathcal{SO}(3)$ in Euler-Winkel Darstellung ergibt sich der Abstand durch die Formel

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) = 2 \arccos \left(\left| \cos \left(\frac{\Delta\varphi}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\psi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \right) - \sin \left(\frac{\Delta\varphi}{2} \right) \sin \left(\frac{\Delta\psi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right| \right). \quad (3.26)$$

Des Weiteren gelten die scharfen Schranken

$$\pi \geq d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq |\theta_1 - \theta_2| \quad (3.27)$$

unabhängig von den Winkeln $\varphi_1, \varphi_2, \psi_1, \psi_2$.

Beweis. Mittels der Euler-Winkel Darstellung (2.16) erhalten wir die Beziehungen

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_2^{-1} &= \mathbf{R}_z(-\psi_2) \mathbf{R}_y(-\theta_2) \mathbf{R}_z(-\varphi_2) \\ \mathbf{H}_1 &= \mathbf{R}_z(\varphi_1) \mathbf{R}_y(\theta_1) \mathbf{R}_z(\psi_1). \end{aligned}$$

Für die Spur der Matrix $\mathbf{H}_2^{-1} \mathbf{H}_1$ können wir uns mit Hilfe der Additionstheoreme leicht von der Gleichung

$$\begin{aligned} \text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1} \mathbf{H}_1) &= \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) (\cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos(\psi_1 - \psi_2)) \\ &\quad + (1 + \cos(\varphi_1 - \varphi_2) \cos(\psi_1 - \psi_2)) (1 + \cos(\theta_1) \cos(\theta_2)) \\ &\quad - \sin(\varphi_1 - \varphi_2) \sin(\psi_1 - \psi_2) (\cos(\theta_1) + \cos(\theta_2)) - 1 \end{aligned} \quad (3.28)$$

überzeugen. Dadurch erhalten wir mit den Differenzen $\Delta\varphi$ und $\Delta\psi$ die Faktorisierungen

$$\begin{aligned} &\text{Spur}(\mathbf{H}_2^{-1} \mathbf{H}_1) + 1 \\ &= \sin(\theta_1) \sin(\theta_2) (\cos(\Delta\varphi) + \cos(\Delta\psi)) - \sin(\Delta\varphi) \sin(\Delta\psi) (\cos(\theta_1) + \cos(\theta_2)) \\ &\quad + (1 + \cos(\Delta\varphi) \cos(\Delta\psi)) (1 + \cos(\theta_1) \cos(\theta_2)) \\ &= 4 \left(\cos \left(\frac{\Delta\varphi}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\psi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \right) - \sin \left(\frac{\Delta\varphi}{2} \right) \sin \left(\frac{\Delta\psi}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_1 + \theta_2}{2} \right) \right)^2 \\ &= 4 \left(\cos \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\varphi + \Delta\psi}{2} \right) + \sin \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\varphi - \Delta\psi}{2} \right) \right)^2 \end{aligned} \quad (3.29)$$

und mit Hilfe der Gleichung (3.13) die Behauptung (3.26). Aufgrund der letzten Gleichung aus (3.29) können wir sofort mit dem Zusammenhang

$$\begin{aligned} &\cos \left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2} \right) \\ &= \left| \cos \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\varphi + \Delta\psi}{2} \right) + \sin \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \cos \left(\frac{\Delta\varphi - \Delta\psi}{2} \right) \right| \\ &\leq \left| \cos \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \cos \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \right| + \left| \sin \left(\frac{\theta_1}{2} \right) \sin \left(\frac{\theta_2}{2} \right) \right| \\ &= \cos \left(\frac{\theta_1 - \theta_2}{2} \right) = \cos \left(\frac{|\theta_1 - \theta_2|}{2} \right) \end{aligned}$$

die Behauptung (3.27) folgern. Die obere Schranke erhalten wir für $\Delta\psi = \pi$ und $\Delta\varphi = 0$, während die untere Schranke für $\Delta\varphi = \Delta\psi = 0$ angenommen wird. \square

Wir können uns wegen der Beziehung (3.27) die Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ in der Euler-Winkel Darstellung als Vereinigung „paralleler Ebenen“

$$E_\theta := \{\mathbf{R}_z(\varphi)\mathbf{R}_y(\theta)\mathbf{R}_z(\psi) \mid \varphi, \psi \in [0, 2\pi)\}, \quad \theta \in [0, \pi],$$

vorstellen (vgl. Abbildung 3.2). Dies hilft uns relativ gleichmäßig verteilte Abtastmengen \mathcal{X} zu konstruieren.

Lemma 3.8. Für $\theta \in (0, \pi)$ seien zwei Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in E_\theta$ in Euler-Winkel Darstellung gegeben. Dann gilt für $q \in (0, \pi]$ unter der Bedingung

$$\sin\left(\frac{|\Delta\varphi|}{2}\right) \geq \frac{\sin\left(\frac{q}{2}\right)}{\sin(\theta)} \quad (3.30)$$

unabhängig von den Winkeln ψ_1, ψ_2 die Separationseigenschaft

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq q.$$

Beweis. Wir betrachten zunächst für $\Delta\varphi \neq 0$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} & \left(\cos\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) - \sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \cos(\theta) \right)^2 \\ & \quad - \cos^2(\theta) \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \\ &= -\cos^2(\theta) \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) - 2 \cos(\theta) \sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \\ & \quad - \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \sin^2\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \\ &= -\sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \left(\cos(\theta) + \tan\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \tan^{-1}\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \right)^2 \leq 0. \end{aligned}$$

Für Rotationen $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2 \in E_\theta$ mit $\mathbf{H}_1 \neq \mathbf{H}_2$ erhalten wir dann mittels der letzten Beziehung und der Gleichung (3.26) die von $\Delta\psi$ unabhängige Schranke

$$\begin{aligned} \cos^2\left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2}\right) &= \left(\cos\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \cos\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) - \sin\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \sin\left(\frac{\Delta\psi}{2}\right) \cos(\theta) \right)^2 \\ &\leq \cos^2(\theta) \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) + \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \\ &= 1 - (1 - \cos^2(\theta)) \left(1 - \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \right). \end{aligned} \quad (3.31)$$

Für $\theta \in (0, \pi)$ ist nun die Bedingung (3.30) äquivalent zu den Ungleichungen

$$\begin{aligned} & 2 \left| \sin\left(\frac{\Delta\varphi}{4}\right) \cos\left(\frac{\Delta\varphi}{4}\right) \right| \geq \left| \frac{\sin\left(\frac{q}{4}\right) \cos\left(\frac{q}{4}\right)}{\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)} \right| \\ \Leftrightarrow & 4 \sin^2\left(\frac{\Delta\varphi}{4}\right) \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{4}\right) \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \geq \sin^2\left(\frac{q}{4}\right) \cos^2\left(\frac{q}{4}\right) \\ \Leftrightarrow & \left(1 - \cos^2\left(\frac{\Delta\varphi}{2}\right) \right) (1 - \cos^2(\theta)) \geq 1 - \cos^2\left(\frac{q}{2}\right). \end{aligned}$$

Hierbei folgt aus der letzten Ungleichung und der Gleichung (3.31) die Abschätzung

$$\cos^2 \left(\frac{d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2)}{2} \right) \leq 1 - (1 - \cos^2(\theta)) \left(1 - \cos^2 \left(\frac{\Delta\varphi}{2} \right) \right) \leq \cos^2 \left(\frac{q}{2} \right).$$

Damit erhalten wir schließlich aufgrund der im Intervall $[0, \frac{\pi}{2}]$ fallenden Monotonie des Kosinus die Separationseigenschaft $d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq q$. \square

Algorithmus 3.2

Input: Separationsabstand $q \in (0, \pi]$

Wähle $M_q, N_q \in \mathbb{N}$ maximal, sodass die Bedingungen $d_\theta := \frac{\pi}{M_q} \geq q$, $d_\psi := \frac{2\pi}{N_q} \geq q$ erfüllt sind.

for $m = 0, \dots, M_q$ **do**

Definiere die Mengen

$$\mathcal{X}_m := \left\{ \mathbf{R}_z(ld_\varphi(\theta)) \mathbf{R}_y(md_\theta) \mathbf{R}_z(nd_\psi) \mid l = 0, \dots, L_q^m - 1, n = 0, \dots, N_q - 1 \right\}$$

mit $L_q^m \in \mathbb{N}$ maximal, sodass $L_q^m d_\varphi(\theta) = 2\pi$ für $d_\varphi(\theta) \geq \pi - 2 \arccos \left(\frac{\sin(\frac{q}{2})}{\sin(md_\theta)} \right)$ gilt.

end for

Setze $\mathcal{X} := \bigcup_{m=0}^{M_q} \mathcal{X}_m$.

Output: q -separierte Abtastmenge \mathcal{X}

Satz 3.9. Für $q \in (0, \pi]$ liefert der Algorithmus 3.2 eine q -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$.

Beweis. Wir betrachten die Abstände zweier verschiedener Rotationen $\mathbf{H}_1 \in \mathcal{X}_{m_1}$ und $\mathbf{H}_2 \in \mathcal{X}_{m_2}$ mit $m_1, m_2 = 0, \dots, M_q$. Mit der unteren Schranke (3.27) aus Lemma 3.7 wissen wir, dass für $m_1 \neq m_2$ die Separationseigenschaft

$$d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) \geq |m_1 d_\theta - m_2 d_\theta| \geq q$$

erfüllt ist. Für $m_1 = m_2$ und $\Delta\varphi = 0$ ist $\Delta\psi = kd_\psi$ für ein $|k| = 1, \dots, N_q - 1$. Aufgrund der Gleichung (3.26) ist auch in diesem Fall die Separationseigenschaft

$$\begin{aligned} d(\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2) &= 2 \arccos \left(\left| \cos \left(\frac{kd_\psi}{2} \right) \right| \right) = 2 \arccos \left(\left| \cos \left(\frac{|k|\pi}{N_q} \right) \right| \right) \\ &= 2 \arccos \left(\cos \left(\left| \frac{\pi}{2} - \left| \frac{\pi}{2} - \frac{|k|\pi}{N_q} \right| \right| \right) \right) = \pi - \left| 1 - \frac{|2k|}{N_q} \right| \pi \geq \frac{2\pi}{N_q} \geq q \end{aligned}$$

für $|k| = 1, \dots, N_q - 1$ erfüllt. Haben wir jedoch $m := m_1 = m_2$ und $\Delta\varphi = jd_\varphi(m\theta)$ mit $|j| = 1, \dots, L_q^m - 1$, so erhalten wir mit der Wahl von $d_\varphi(m\theta) \geq \pi - 2 \arccos \left(\frac{\sin(\frac{q}{2})}{\sin(md_\theta)} \right)$ und L_q^m die Beziehung

$$\begin{aligned} \left| |\Delta\varphi| - \pi \right| &= \left| |jd_\varphi(m\theta)| - \pi \right| \leq \left| L_q^m d_\varphi(m\theta) - d_\varphi(m\theta) - \pi \right| \\ &= \left| d_\varphi(m\theta) - \pi \right| = \pi - d_\varphi(m\theta) \\ &\leq 2 \arccos \left(\frac{\sin(\frac{q}{2})}{\sin(md_\theta)} \right) \end{aligned}$$

für $|j| = 1, \dots, L_q^m - 1$. Damit folgt die Abschätzung

$$\sin\left(\frac{|\Delta\varphi|}{2}\right) = \cos\left(\frac{|\Delta\varphi|}{2} - \frac{\pi}{2}\right) \geq \frac{\sin\left(\frac{q}{2}\right)}{\sin(\theta)}$$

und schließlich mit Lemma 3.8 die Behauptung. \square

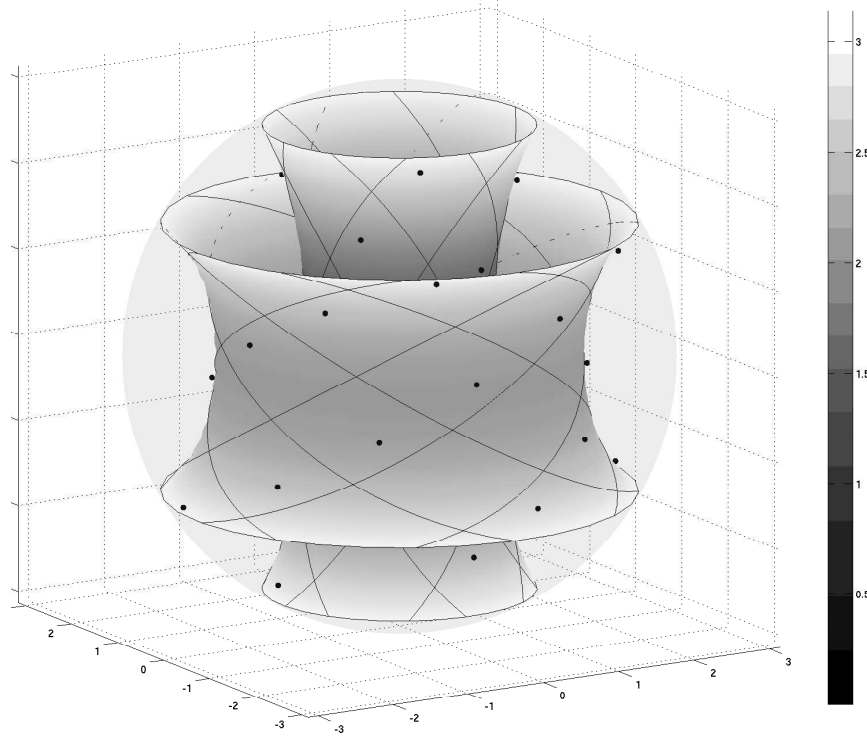


Abbildung 3.2: Visualisierung in Achse-Rotationswinkel Darstellung der zwei „parallelen Ebenen“ $E_{\frac{1}{3}\pi}$ und $E_{\frac{2}{3}\pi}$ mit Punkten $\frac{1}{3}\pi$ -separierter Teilmengen, die nach Algorithmus 3.2 konstruiert wurden. Die Graustufen geben den Abstand in der Metrik d zur Identität I an.

Für die Generierung relativ gleichmäßig verteilter Abtastmengen gibt es noch weitere Methoden, die z.B. in [33, 38, 24] vorgestellt werden. In [24] wurden ausgewählte Methoden numerischen Tests über die Güte der erzeugten Abtastmengen unterzogen. Unter diesen wurde auch das sogenannte „Variable stepping“-Verfahren vorgestellt, das dem obigen entspricht, da darin auch der zweite und dritte Euler-Winkel äquidistant abgetastet wird. Aufgrund einer Pi-mal-Daumen Argumentation wurde in diesem Verfahren jedoch, im Gegensatz zu der korrekten (3.30), die folgende Schrittweitenwahl

$$d_\varphi(\theta) \geq \frac{q}{\sin(\theta)}$$

des ersten Euler-Winkels gewählt, welche zumindest für θ in der Nähe von $\frac{\pi}{2}$ eine sehr gute Näherung ist. Deswegen konnte das „Variable stepping“-Verfahren im Separationsabstandstest in [24] nicht so gut abschneiden.

4 Interpolation

Als eine Problemstellung zur polynomialen Approximation von Funktionen auf der $\mathcal{SO}(3)$ stellen wir uns die folgende Interpolationsaufgabe. Für $M \in \mathbb{N}$ sei die Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ mit zugehörigen Funktionswerten $\mathbf{y} := (y_0, \dots, y_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$ gegeben. Nun ist ein Polynom $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ vom Grad $N \in \mathbb{N}_0$ gesucht, welches die Werte y_i in den Abtastpunkten \mathbf{G}_i interpoliert, d.h., es gilt $\mathbf{f} := (f(\mathbf{G}_0), \dots, f(\mathbf{G}_{M-1}))^T = \mathbf{y}$. Um die Eindeutigkeit der Lösung für beliebige Vektoren \mathbf{y} zu garantieren, definieren wir mit Hilfe der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung (2.19) von f das streng konvexe Optimierungsproblem

$$\min_{\hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \sum_{(l,k,k') \in J_N} \frac{|\hat{f}_l^{k,k'}|^2}{\hat{w}_l}, \text{ sodass } \sum_{(l,k,k') \in J_N} \hat{f}_l^{k,k'} D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) = y_i \text{ für } i = 0, \dots, M-1 \quad (4.1)$$

zu vorgegebenen Gewichten $\hat{\mathbf{w}}_N = (\hat{w}_0, \dots, \hat{w}_N)^T \in \mathbb{R}_+^{N+1}$ mit $d_N := \dim \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$.

In Matrix-Vektor-Schreibweise erhalten wir mit Hilfe der Diagonalmatrix $\hat{\mathbf{W}} := \text{diag}(\hat{\mathbf{w}}) \in \mathbb{R}^{d_N \times d_N}$ des Vektors $\hat{\mathbf{w}} := (\hat{w}_l)_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{R}_+^{d_N}$, der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} := (D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i))_{i=0, \dots, M-1; (l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ und dem $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten-Vektor $\hat{\mathbf{f}} := (\hat{f}_l^{k,k'})_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{d_N}$ die kompakt geschriebene Variante

$$\min_{\hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \hat{\mathbf{f}}^H \hat{\mathbf{W}}^{-1} \hat{\mathbf{f}}, \text{ sodass } \mathbf{D} \hat{\mathbf{f}} = \mathbf{y}. \quad (4.2)$$

Das anschließende Lemma sagt aus, dass die Optimallösung des Problems (4.1) durch Lösen eines linearen Gleichungssystems gewonnen werden kann. Dabei stellt sich die aufgestellte Systemmatrix als eine symmetrisch positiv semidefinite Matrix heraus. Ein wesentliches Resultat wird sein, dass sich diese Matrix bei fest vorgegebener Abtastmenge \mathcal{X} , durch eine freie Wahl der Gewichte $\hat{\mathbf{w}}$ und eines hinreichend großen Polynomgrads N , beliebig gut konditionieren lässt. Dem entgegen sind jedoch in Anwendungen die Gewichte $\hat{\mathbf{w}}_N$ fest vorgegeben und es besteht der Wunsch den Polynomgrad N möglichst klein zu wählen. Mit einem Vergleichsargument werden wir aber auch Abschätzungen der Kondition spezieller polynomialer Interpolationsprobleme mit vorgegebenen Gewichten $\hat{\mathbf{w}}_N$ angeben können.

Lemma 4.1. *Die Interpolationsaufgabe (4.1) bzw. (4.2) ist äquivalent zur Normalengleichung zweiter Art*

$$\mathbf{D} \hat{\mathbf{W}} \mathbf{D}^H \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{y}, \quad \hat{\mathbf{f}} = \hat{\mathbf{W}} \mathbf{D}^H \tilde{\mathbf{f}}. \quad (4.3)$$

Des Weiteren gilt mittels des trigonometrischen Polynoms

$$K_N : [-\pi, \pi] \rightarrow \mathbb{R}, \quad K_N(t) := \sum_{l=0}^N \hat{w}_l U_{2l} \left(\cos \frac{t}{2} \right) \quad (4.4)$$

in Darstellung mit Hilfe der Chebyshev-Polynome U_l zweiter Art und der dadurch entstehenden Matrix

$$\mathbf{K} := (K_N(\mathbf{d}(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)))_{i,j=0, \dots, M-1} \quad (4.5)$$

die Beziehung

$$\mathbf{K} = \mathbf{D} \hat{\mathbf{W}} \mathbf{D}^H. \quad (4.6)$$

Mit den Gewichten $w_k := \sum_{l=|k|}^N \hat{w}_l$ für $k = -N, \dots, N$ haben wir die trigonometrische Darstellung

$$K_N(t) = \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt}. \quad (4.7)$$

Beweis. Das Gleichungssystem (4.3) ist wegen [2, Theorem 1.1.2] mit der Matrix $\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}}$ äquivalent zu dem streng konvexen Optimierungsproblem (4.2). Die Beziehung (4.6) leitet sich aus dem Additionstheorem für die Wigner-D-Funktionen (2.21) durch die Beziehung

$$\begin{aligned} (\mathbf{K})_{i,j} &= \sum_{l=0}^N \hat{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \overline{D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_j)} \\ &= \sum_{l=0}^N \hat{w}_l U_{2l} \left(\cos \frac{d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)}{2} \right) \end{aligned}$$

ab. Wir erhalten zusätzlich mit der Eigenschaft (2.5) der Chebyshev-Polynome die Identität

$$K_N = \sum_{l=0}^N \hat{w}_l U_{2l} = \sum_{l=0}^N \sum_{k=0}^l \hat{w}_l (2 - \delta_{0,k}) T_{2k} = \sum_{k=0}^N \sum_{l=k}^N \hat{w}_l (2 - \delta_{0,k}) T_{2k}.$$

Setzen wir $w_k := \sum_{l=|k|}^N \hat{w}_l$ für $k = -N, \dots, N$, so folgt mit der Definition (2.2) der Chebyshev-Polynome T_k schließlich für $t \in [-2\pi, 2\pi]$ durch

$$K_N(t) = \sum_{k=0}^N w_k (2 - \delta_{0,k}) T_{2k} \left(\cos \left(\frac{t}{2} \right) \right) = \sum_{k=0}^N w_k (2 - \delta_{0,k}) \cos(kt) = \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt}$$

die Behauptung (4.7). □

Zu bemerken ist noch, dass die entstandene Systemmatrix \mathbf{K} eindeutig in dem Sinne ist, dass sie nicht von der Skalierung der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten $\hat{\mathbf{f}}$ abhängt. Genauer sei $\mathbf{d} \in \mathbb{R}_+^{d_N}$, dann ist das Interpolationsproblem (4.3) äquivalent zu dem Optimierungsproblem

$$\min_{\bar{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \bar{\mathbf{f}}^H \bar{\mathbf{W}}^{-1} \bar{\mathbf{f}}, \quad \text{so dass } \bar{\mathbf{D}} \bar{\mathbf{f}} = \mathbf{y}$$

mit den skalierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten $\bar{\mathbf{f}} := \text{diag}(\mathbf{d}) \hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}$, der skalierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\bar{\mathbf{D}} := \mathbf{D} \text{diag}(\mathbf{d})^{-1} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ und der Gewichtsmatrix $\bar{\mathbf{W}} := \text{diag}(\mathbf{d}) \hat{\mathbf{W}} \text{diag}(\mathbf{d}) \in \mathbb{C}^{d_N \times d_N}$. Trotzdem gilt $\mathbf{K} = \mathbf{D} \hat{\mathbf{W}} \mathbf{D}^H = \bar{\mathbf{D}} \bar{\mathbf{W}} \bar{\mathbf{D}}^H$. Zur Abschätzung der Konditionszahl $\kappa(\mathbf{K})$ der Systemmatrix \mathbf{K} des Gleichungssystems (4.2) werden wir dem Ansatz aus [18, Abschnitt 4] folgen. Dabei gilt es zunächst gutartige Gewichte $\hat{\mathbf{w}}_N$ in Abhängigkeit des Polynomgrads N zu konstruieren. Diese werden wir durch die Konstruktion trigonometrischer Polynome erhalten, welche eine gewisse Lokalisierungseigenschaft besitzen. Mit deren Hilfe lassen sich dann auch Aussagen über die Stabilität von Interpolationsaufgaben mit anderen Gewichten $\hat{\mathbf{w}}$ und Polynomgrad N machen. Dabei wird sich die folgende schon in Lemma 4.1 benutzte Beziehung zusammen mit dem Lemma 4.2 als nützlich erweisen. Für

$\mathbf{c} = (c_0, \dots, c_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$ gilt unter Benutzung des Additionstheorems (2.21) für Wigner-D-Funktionen die Gleichung

$$\begin{aligned} \mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{c} &= \sum_{i,j=0}^{M-1} c_i \overline{c_j} \sum_{l=0}^N \hat{w}_l U_{2l} \left(\cos \frac{d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)}{2} \right) = \sum_{i,j=0}^{M-1} c_i \overline{c_j} \sum_{l=0}^N \hat{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \overline{D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_j)} \\ &= \sum_{l=0}^N \hat{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Lemma 4.2. Für eine hermitesche Matrix $\mathbf{A} = \mathbf{A}^H \in \mathbb{C}^{M \times M}$, $M \in \mathbb{N}$, gilt die Eigenschaft

$$\lambda_1(\mathbf{A}) = \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^M \setminus \{0\}} \frac{\mathbf{c}^H \mathbf{A} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^H \mathbf{c}} \leq \max_{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^M \setminus \{0\}} \frac{\mathbf{c}^H \mathbf{A} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^H \mathbf{c}} = \lambda_M(\mathbf{A}), \quad (4.9)$$

wobei $\lambda_1(\mathbf{A}) \leq \dots \leq \lambda_M(\mathbf{A})$ die Eigenwerte von \mathbf{A} sind.

Beweis. Siehe [17, Theorem 4.2.2]. □

4.1 Konstruktion lokalisierter trigonometrischer Polynome

4.1.1 Die Lokalisierungseigenschaft

Zu gegebenem Koeffizienten $\mathbf{w}_N = (w_{-N}, \dots, w_N)^T \in \mathbb{R}_+^{2N+1}$, $N \in \mathbb{N}_0$, lässt sich für $\beta \in \mathbb{N}$ die Lokalisierungseigenschaft

$$|K(x)| \leq \frac{c_{\beta,N}}{|x|^\beta} \text{ für eine geeignete Konstante } c_{\beta,N} \in \mathbb{R}_+ \text{ und } x \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right] \setminus \{0\} \quad (4.10)$$

eines trigonometrischen Polynoms $K(x) := \sum_{k=-N}^N w_k e^{2\pi i k x}$ angeben. Dieser Ungleichung werden wir uns im Folgenden auf zweierlei Arten nähern. Die diskrete Methode ist allgemeiner und stellt an die Koeffizienten \mathbf{w}_N zunächst keine weiteren Bedingungen. Jedoch wird sich zeigen, dass die aus diesem Vorgehen gewonnenen Abschätzungen für spezielle Gewichte \mathbf{w}_N etwas schlechter sind als die durch die kontinuierliche Methode nach [21, Lemma 3.2] mit Hilfe der Poissonschen Summenformel. Dabei interessieren uns besonders Folgen positiver Koeffizienten $\{\mathbf{w}_N\}_{N \in \mathbb{N}_0}$ mit $\|\mathbf{w}_N\|_1 = 1$ für welche die in (4.10) gegebene Konstante $c_{\beta,N}$ mit möglichst großer Ordnung für $N \rightarrow \infty$ gegen Null gehen.

Diskrete Variante

Mit $\ell^1 := \{w = (w_n)_{n \in \mathbb{Z}} \mid \|w\|_1 < \infty\}$ bezeichnen wir den ℓ^1 -Folgenraum, wobei die ℓ^1 -Norm einer Folge $w := (w_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ durch

$$\|w\|_1 := \sum_{n \in \mathbb{Z}} |w_n|$$

gegeben ist. Außerdem definieren wir den diskreten Differenzenoperator Δ^β der Ordnung $\beta \in \mathbb{N}$ angewendet auf die Folge $w = (w_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ induktiv durch

$$\begin{aligned} (\Delta w)_n &:= (\Delta^1 w)_n := w_n - w_{n-1} \quad \text{und} \\ (\Delta^\beta w)_n &:= (\Delta(\Delta^{\beta-1} w))_n \text{ für } \beta > 1. \end{aligned}$$

Dann gilt mittels vollständiger Induktion und der Eigenschaften des Binomialkoeffizienten die leicht einzusehende Beziehung

$$(\Delta^\beta w)_n = \sum_{l \in \mathbb{Z}} \binom{\beta}{l} (-1)^l w_{n-l}.$$

Der folgenden Satz bildet die Grundlage der diskreten Methode. Auf diesen werden wir aufbauen, um für trigonometrische Polynome die Lokalisierungseigenschaft (4.10) zu erhalten.

Satz 4.3. Sei für $N \in \mathbb{N}_0$ eine Folge $w = (w_k)_{k \in \mathbb{Z}}$ mit $w_k = 0$ für $|k| > N$ gegeben, dann gilt für das trigonometrische Polynom $K(x) := \sum_{k=-N}^N w_k e^{2\pi i k x}$ vom Grad N mit $x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \setminus \{0\}$ und $\beta \in \mathbb{N}$ das folgende Abklingverhalten

$$|K(x)| \leq \frac{1}{|4x|^\beta} \left\| \Delta^\beta w \right\|_1. \quad (4.11)$$

Beweis. Sei $x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \setminus \{0\}$ gegeben. Es folgen unter Benutzung des binomischen Lehrsatzes und der Darstellung der β -ten Differenz $\Delta^\beta w$ der Folge w die Gleichungen

$$\begin{aligned} K(x) &= \sum_{k \in \mathbb{Z}} w_k e^{2\pi i k x} = \frac{1}{(e^{2\pi i x} - 1)^\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}} w_k \sum_{l=0}^{\beta} \binom{\beta}{l} (-1)^{(\beta-l)} e^{2\pi i (k+l)x} \\ &= \frac{1}{e^{\pi i \beta x} (e^{\pi i x} - e^{-\pi i x})^\beta} \sum_{l=0}^{\beta} \sum_{k \in \mathbb{Z}} w_k \binom{\beta}{l} (-1)^{(\beta-l)} e^{2\pi i (k+l)x} \\ &= \frac{(-i)^\beta}{e^{\pi i \beta x} (2 \sin \pi x)^\beta} \sum_{l=0}^{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} w_{n-l} \binom{\beta}{l} (-1)^{(\beta-l)} e^{2\pi i n x} \\ &= \frac{(-i)^\beta}{e^{\pi i \beta x} (2 \sin \pi x)^\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} (\Delta^\beta w)_n e^{2\pi i n x}. \end{aligned}$$

Mit der Dreiecksungleichung und der Eigenschaft $|\sin \pi x| \geq |2x|$ erhalten wir die Behauptung (4.11). \square

Bemerkung 4.4. Analog zu diesem Beweis können wir auch die Aussage in [23, Proposition 2.2] auf sehr viel einfacherem Wege, als in der dort angegebenen Weise, erzielen.

Die folgenden Aussagen beschäftigen sich mit dem Verhalten der ℓ^1 -Norm der β -ten Differenz einer Folge w von Abtastwerten einer hinreichend glatten Funktion mit kompaktem Träger. Dabei untersuchen wir speziell Splines vom Grad β . Dazu definieren wir für ein kompaktes Intervall $I \subset \mathbb{R}$, $h \in \mathbb{R}_+$ und $\beta \in \mathbb{N}$ die finite Differenz β -ter Ordnung $\Delta_h^\beta : \mathcal{BV}(I) \rightarrow \mathcal{BV}(I)$ zur Schrittweite h von f an der Stelle $x \in \mathbb{R}$ durch

$$\begin{aligned} \Delta_h f(x) &:= \Delta_h^1 f(x) := f(x) - f(x-h) \quad \text{und} \\ \Delta_h^\beta f(x) &:= \Delta_h(\Delta_h^{\beta-1} f)(x) \quad \text{für } \beta > 1. \end{aligned}$$

Wie beim Differenzenoperator Δ^β für Folgen können wir uns durch leichte Rechnung von dem binomialen Zusammenhang

$$\Delta_h^\beta f(\cdot) = \sum_{l=0}^{\beta} \binom{\beta}{l} (-1)^l f(\cdot - lh) \quad (4.12)$$

überzeugen.

Lemma 4.5. Für $2 \leq \beta \in \mathbb{N}$ ist der β -te (zentrierte) kardinale B-Spline

$$N_\beta(x) := \frac{1}{(\beta-1)!} \sum_{l=0}^{\beta} (-1)^l \binom{\beta}{l} \left(x + \frac{\beta}{2} - l\right)_+^{\beta-1} \in \mathcal{S}_0^{\beta-1} \left(\left[-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}\right] \right) \quad (4.13)$$

ein Spline vom Grad β mit kompaktem Träger $\text{supp } N_\beta = \left[-\frac{\beta}{2}, \frac{\beta}{2}\right]$ und es gilt die Eigenschaft

$$1 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} N_\beta(x - n) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}, \quad (4.14)$$

d.h., die β -ten kardinalen B-Splines bilden eine Partition der Eins.

Beweis. Diese Eigenschaften finden sich unter anderem in [31, Lecture 2]. \square

Lemma 4.6. Mit $\beta \in \mathbb{N}$ besteht zwischen der β -ten finiten Differenz zur Schrittweite h der abgeschnittenen Potenzfunktionen $(\cdot)_+^{\beta-1}$ und den kardinalen B-Splines N_β für $x \in \mathbb{R}$ der Zusammenhang

$$\Delta_h^\beta (\cdot)_+^{\beta-1}(x) = (\beta-1)! h^{\beta-1} N_\beta \left(h^{-1}x - \frac{\beta}{2} \right). \quad (4.15)$$

Insbesondere gelten für $x_0 \in \mathbb{R}$ mit der Folge $w = \left\{ (x_0 + nh)_+^{\beta-1} \right\}_{n \in \mathbb{Z}}$ die Aussagen

$$(\Delta^\beta w)_n = (\beta-1)! h^{\beta-1} N_\beta \left(h^{-1}x_0 + n - \frac{\beta}{2} \right), \quad (4.16)$$

$$\left\| \Delta^\beta w \right\|_1 = (\beta-1)! h^{\beta-1}. \quad (4.17)$$

Beweis. Es folgt mit der Beziehung (4.12) die Gleichung

$$\Delta_h^\beta (\cdot)_+^{\beta-1}(x) = \sum_{l=0}^{\beta} (-1)^l \binom{\beta}{l} (x - hl)_+^{\beta-1} = h^{\beta-1} \sum_{l=0}^{\beta} (-1)^l \binom{\beta}{l} (h^{-1}x - l)_+^{\beta-1},$$

aus welcher mit der Darstellung des β -ten kardinalen B-Spline (4.13) die Aussage (4.15) folgt. Durch die Identität

$$(\Delta^\beta w)_n = \sum_{l=0}^{\beta} (-1)^l \binom{\beta}{l} (x_0 + hn - hl)_+^{\beta-1} = \Delta_h^\beta (\cdot)_+^{\beta-1}(x_0 + nh) \quad \text{für alle } n \in \mathbb{Z}$$

und der Tatsache, dass die verschobenen β -ten kardinalen B-Splines $\{N_\beta(\cdot - n)\}_{n \in \mathbb{Z}}$ eine Partition der Eins (4.14) bilden, folgen die Behauptungen (4.16) und (4.17). \square

Mit den Lemmata 4.6 und 2.3 erhalten wir nun obere Schranken für die ℓ^1 -Norm der β -ten Differenz von Folgen abgetasteter Splines.

Satz 4.7. Sei für ein kompaktes Intervall $I = [a, b]$ und Knoten $a = x_1 < x_2 < \dots < x_m = b \in I$ mit $2 \leq \beta, m \in \mathbb{N}$ die Funktion $g \in \mathcal{S}_0^{\beta-1}(I, [x_1, \dots, x_m])$ gegeben. Dann gilt für $h \in \mathbb{R}_+$ mit der Folge $w := \{g(nh)\}_{n \in \mathbb{Z}}$ die Abschätzung

$$\left\| \Delta^\beta w \right\|_1 \leq h^{\beta-1} \left| g^{(\beta-1)} \right|_V, \quad (4.18)$$

wobei Gleichheit für

$$h < \frac{q_K}{\beta} \quad (4.19)$$

mit dem Separationsabstand $q_K := \min_{x \neq y \in \{x_1, \dots, x_m\}} |x - y|$ angenommen wird.

Beweis. Mit der Darstellung von g nach Lemma 2.3, der Linearität des Operators Δ_h^β und der Eigenschaft (4.15) aus Lemma 4.6 folgt die Beziehung

$$\begin{aligned} \left\| \Delta^\beta w \right\|_1 &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left| \Delta_h^\beta g(nh) \right| = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{(\beta-1)!} \left| \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) \Delta_h^\beta(\cdot)_+^{\beta-1}(nh-x_l) \right| \\ &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} \left| h^{\beta-1} \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right) \right| \end{aligned}$$

und mit der Dreiecksungleichung die Abschätzung

$$\sum_{n \in \mathbb{Z}} \left| h^{\beta-1} \sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right) \right| \leq \sum_{n \in \mathbb{Z}} h^{\beta-1} \sum_{l=1}^m |\sigma_g(x_l)| \left| N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right) \right|.$$

Unter der Bedingung (4.19) gilt sogar Gleichheit, da dann für ein festes $n \in \mathbb{Z}$ auf der linken Seite der letzten Ungleichung in der Summe $\sum_{l=1}^m \sigma_g(x_l) N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right)$ nur höchstens ein Summand von Null verschieden ist. Dies liegt an der Länge des Trägers $|\text{supp } N_\beta(h^{-1}\cdot)| = h\beta$ der skalierten kardinalen B-Splines. Denn ist ein Knoten $x_j \in \text{supp } N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}\cdot \right)$, so folgt für $k \in \{1, \dots, m\}$, $k \neq j$, die Abschätzung

$$|x_j - x_k| \geq q_K > \beta h = \left| \text{supp } N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}\cdot \right) \right|$$

und damit ist $N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_k \right) = 0$. Weiterhin benutzen wir wieder die Eigenschaft, dass die kardinalen B-Splines $\{N_\beta(\cdot - n)\}_{n \in \mathbb{Z}}$ eine Partition der Eins (4.14) bilden. Dann folgt mit der leicht einzusehenden Eigenschaft der totalen Variation der $(\beta-1)$ -ten verallgemeinerten Ableitung von Splines vom Grad $(\beta-1)$

$$\left| g^{(\beta-1)} \right|_V = \sum_{l=1}^m |\sigma_g(x_l)|, \quad \text{wegen } g^{(\beta-1)}(x_1) = g^{(\beta-1)}(x_m) = 0,$$

die Gleichung

$$\begin{aligned} \sum_{n \in \mathbb{Z}} h^{\beta-1} \sum_{l=1}^m |\sigma_g(x_l)| \left| N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right) \right| &= \sum_{l=1}^m h^{\beta-1} |\sigma_g(x_l)| \sum_{n \in \mathbb{Z}} N_\beta \left(n - \frac{\beta}{2} - h^{-1}x_l \right) \\ &= \sum_{l=1}^m h^{\beta-1} |\sigma_g(x_l)| = h^{\beta-1} \left| g^{(\beta-1)} \right|_V \end{aligned}$$

und damit die Behauptung (4.18). \square

Folgerung 4.8. Für $2 \leq \beta \in \mathbb{N}$, $N \in \mathbb{N}_0$ und $g \in \mathcal{S}_0^{\beta-1} \left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \right)$ gilt für das trigonometrische Polynom

$$K(x) := \sum_{k=-N}^N g \left(\frac{k}{2(N+1)} \right) e^{2\pi i k x} \quad (4.20)$$

für $x \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$|K(x)| \leq \frac{\left| g^{(\beta-1)} \right|_V}{2(4(N+1))^{\beta-1} |2x|^\beta}.$$

Beweis. Wir erhalten mit der Folge $w := \left(g \left(\frac{k}{2(N+1)} \right) \right)_{k \in \mathbb{Z}}$ nach Satz 4.7 die Schranke

$$\left\| \Delta^\beta w \right\|_1 \leq \frac{1}{(2(N+1))^{\beta-1}} \left| g^{(\beta-1)} \right|_V,$$

da die Abschätzung unabhängig von der zum Spline g zugehörigen Knotenmenge ist. Mit dem Satz 4.3 folgt dann die Behauptung. \square

Kontinuierliche Variante

Eine Methode, die von Anfang an auf Abtastwerte glatter Funktionen baut, um eine Lokalisierungseigenschaft wie (4.10) zu zeigen, wurde in [21] verfolgt. Dabei wurde im Wesentlichen das Abfallprinzip der Fourier-Analyse für glatte Fourier-Transformierte mit Hilfe der Poissonschen Summenformel auf den diskreten Fall übertragen.

Satz 4.9. Für $2 \leq \beta \in \mathbb{N}$ sei eine Funktion $g \in \mathcal{BV}_0^{\beta-1} \left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \right)$ gegeben, dann gilt für $N \in \mathbb{N}_0$ und $x \in \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right] \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$|K(x)| \leq \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta) \left| g^{(\beta-1)} \right|_V}{(4(N+1))^{\beta-1} |2\pi x|^\beta} \quad (4.21)$$

für das trigonometrische Polynom $K(x) := \sum_{k=-N}^N g \left(\frac{k}{2(N+1)} \right) e^{2\pi i k x}$.

Beweis. Siehe Beweis von [21, Lemma 3.2]. \square

An dieser Stelle bemerken wir, dass für $\beta = 1$ nach Satz 4.3 auch die diskrete Methode anwendbar ist. Des Weiteren liefern für $\beta = 2$ die diskrete (4.20) und die kontinuierliche Variante (4.21) identische Abschätzungen, falls das trigonometrische Polynom $K(x)$ durch Abtastung von Splines vom Grad $\beta - 1$ entsteht. Für $\beta > 2$ erhalten wir jedoch durch die kontinuierliche Variante kleinere Konstanten $c_{\beta,N}$ der Lokalisierungseigenschaft (4.10).

4.1.2 Schranken für $\|g\|_{1,N}$

Für $N \in \mathbb{N}$ und eine Funktion $g \in \mathcal{BV}([-1, 1])$ haben wir das normierte trigonometrische Polynom $K(x) := \frac{1}{\|\mathbf{w}_N\|_1} \sum_{k=-N}^N w_k e^{2\pi i k x}$ durch die Koeffizienten $\mathbf{w}_N := \left(g \left(\frac{-N}{N} \right), \dots, g \left(\frac{N}{N} \right) \right)$ gegeben. Um gute Konstanten für die Lokalisierungseigenschaft (4.10) dieses Polynoms $K(x)$ angeben zu können, brauchen wir wegen der vorangegangenen Schritte nur noch gute untere Schranken der ℓ^1 -Norm des Abtastvektors \mathbf{w}_N , in Abhängigkeit von N . Diese werden wir uns dabei auf natürlichere Weise als in [21] erarbeiten. Als Erstes werden wir Beziehungen der Summe der Abtastfolge $\left\{ g \left(\frac{k}{N} \right) \right\}_{k=0}^N$ zum bestimmten Integral $\int_0^1 g(x) dx$ der Funktion g angeben.

Lemma 4.10. Sei $g : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ eine Funktion, die für eine auf $[0, 1]$ Riemann-integrierbare Funktion $g' : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ durch $g(x) := g(0) + \int_0^x g'(t) dt$ gegeben ist. Dann gilt für die Summe der Abtastfolge $\left\{ g \left(\frac{k}{N} \right) \right\}_{k=0}^N$, $N \in \mathbb{N}$, die Integraldarstellung

$$\sum_{k=0}^N g \left(\frac{k}{N} \right) = N g(1) + g(0) - \int_0^1 [Nt] g'(t) dt. \quad (4.22)$$

Insbesondere erhalten wir für $c \in [0, 1)$ mit der stetigen Approximation $(\cdot - c)$ der Gauß-Klammer $[\cdot]$ eine einfache Euler-Maclaurinsche Summenformel

$$\sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) = cg(1) + (1-c)g(0) + N \int_0^1 g(t)dt + \int_0^1 (Nt - [Nt] - c)g'(t)dt, \quad (4.23)$$

wobei das Integral $\int_0^1 ([Nt] - Nt + c)g'(t)dt$ für festes g unabhängig von N durch $\|[N\cdot] - N\cdot + c\|_\infty \leq \max\{c, 1-c\}$ beschränkt bleibt.

Beweis. Mit Hilfe des Riemannsches Integralbegriffs erhält man durch Bilden von Teilintegralen und Umsortieren die Beziehung

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) &= (N+1)g(0) + \sum_{k=1}^N \int_0^{\frac{k}{N}} g'(t)dt = (N+1)g(0) + \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^k \int_{\frac{l-1}{N}}^{\frac{l}{N}} g'(t)dt \\ &= (N+1)g(0) + \sum_{l=1}^N (N+1-l) \int_{\frac{l-1}{N}}^{\frac{l}{N}} g'(t)dt = (N+1)g(1) - \sum_{l=1}^N \int_{\frac{l-1}{N}}^{\frac{l}{N}} lg'(t)dt \\ &= (N+1)g(1) - \sum_{l=1}^N \int_{\frac{l-1}{N}}^{\frac{l}{N}} (l-1)g'(t)dt - \int_0^1 g'(t)dt \\ &= Ng(1) + g(0) - \int_0^1 [Nt]g'(t)dt, \end{aligned}$$

aus welcher die Aussage (4.22) folgt.

Setzen wir in das obige Resultat nun die approximierende Funktion $(N\cdot - c)g'(\cdot)$ als produktive Null unter das Integral ein, so ergibt sich

$$\sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) = Ng(1) + g(0) - \int_0^1 ([Nt] - Nt + c)g'(t)dt - \int_0^1 (Nt - c)g'(t)dt,$$

woraus wir durch partielle Integration des Integrals $\int_0^1 (Nt - c)g'(t)dt$ die Behauptung (4.23) erhalten. \square

Die Idee, die Gauß-Klammer gleichmäßig auf \mathbb{R} durch ein Polynom vom Grad eins zu approximieren, um durch partielle Integration auf einen Zusammenhang zwischen der Summe und dem Integral zu kommen, werden wir im Folgenden weiter ausbauen. Dadurch können wir auch für glattere Funktionen g ähnliche Zusammenhänge wie (4.10) in Abhängigkeit höherer Ableitungen herleiten. Dazu definieren wir für $r \in \mathbb{N}_0$ die r -fach integrierte Gauß-Klammer $[\cdot]_{r+1} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ induktiv durch

$$\begin{aligned} [x]_1 &:= [x] \quad \text{und} \\ [x]_{r+1} &:= \int_0^x [t]_r dt \quad \text{für } r \geq 1. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Mit folgendem Lemma zeigt sich unter anderem, dass für $k \in \mathbb{N}_0$ die Bernoulli-Polynome $B_k(\cdot) \in \Pi_k(\mathbb{R})$, die wir induktiv durch

$$\begin{aligned} B_0(x) &:= 1 \quad \text{und} \\ B'_k(x) &:= kB_{k-1}(x) \quad \text{mit } \int_0^1 B_k(t)dt = 0 \quad \text{für } k > 0 \end{aligned} \quad (4.25)$$

definieren, die gewünschte Approximationseigenschaft

$$\left| [x]_k - \frac{1}{k!} B_k(x) \right| \leq C_k \quad \text{für } x \in \mathbb{R}$$

und eine von x unabhängige Konstante $C_k \in \mathbb{R}_+$ besitzen. Des Weiteren definieren wir noch die Bernoulli-Zahlen $B_k := B_k(0)$.

Lemma 4.11. Für $k \in \mathbb{N}$ und $x \in \mathbb{R}$ erfüllen die Bernoulli-Polynome $B_k(\cdot)$ die Beziehung

$$kx^{k-1} = B_k(x+1) - B_k(x) \quad (4.26)$$

sowie die Identität

$$[x]_k = \frac{1}{k!} (B_k(x) - B_k(x - [x])). \quad (4.27)$$

Des Weiteren sind für $l := 2k$ die lokalen Extrema der Bernoulli-Polynome $B_l(\cdot)$ im Intervall $[0, 1]$ an den Stellen $0, \frac{1}{2}$ und 1 mit den Werten $B_l(0) = B_l(1) = B_l$ und $B_l(\frac{1}{2}) = (\frac{1}{2^{l-1}} - 1) B_l$.

Beweis. Die Aussage (4.26) beweisen wir mittels vollständiger Induktion. Für $k = 1$ gilt

$$B_1(x+1) - B_1(x) = x+1 - \frac{1}{2} - \left(x - \frac{1}{2}\right) = 1x^0.$$

Mit der Induktionsvoraussetzung und der Definition (4.25) der Bernoulli-Polynome führen wir nun den Induktionsschritt von k nach $k+1$. Damit gelte für alle $x \in \mathbb{R}$ und $k' \in \mathbb{N}$ mit $1 \leq k' \leq k$ die Gleichung (4.26) und es folgt

$$\begin{aligned} B_{k+1}(x+1) - B_{k+1}(x) &= (k+1) \int_x^{x+1} B_k(t) dt \\ &= (k+1) \left(\int_0^{x+1} B_k(t) dt - \int_1^{x+1} B_k(t-1) dt \right). \end{aligned}$$

Mit der Eigenschaft der Bernoulli-Polynome $B_k(\cdot)$ aus der Definition (4.25) und der Induktionsvoraussetzung können wir mit

$$\begin{aligned} (k+1) \left(\int_0^{x+1} B_k(t) dt - \int_1^{x+1} B_k(t-1) dt \right) &= (k+1) \int_1^{x+1} B_k(t) - B_k(t-1) dt \\ &= (k+1) \int_1^{x+1} k(t-1)^{k-1} dt = (k+1)x^k \end{aligned}$$

den Induktionschluss ziehen.

Um die Gleichung (4.27) für $x \geq 0$ zu beweisen, reicht es für $n \in \mathbb{N}_0$ und $\tilde{x} \in [0, 1]$ die Beziehung

$$[\tilde{x} + n]_k = \frac{1}{k!} (B_k(\tilde{x} + n) - B_k(\tilde{x}))$$

zu zeigen. Zunächst gilt für $n \in \mathbb{N}_0$ und $\tilde{x} \in [0, 1]$ die Beziehung

$$[\tilde{x} + n] = n = \tilde{x} + n - \frac{1}{2} - \left(\tilde{x} - \frac{1}{2}\right) = B_1(\tilde{x} + n) - B_1(\tilde{x}).$$

Des Weiteren gilt der mittels vollständiger Induktion über n leicht einzusehende Zusammenhang

$$[\tilde{x} + n] = \sum_{l=1}^n \chi_{[0, \infty)}(\tilde{x} + n - l).$$

Damit folgt aufgrund der Definition (4.24) für $k \in \mathbb{N}$ mit $k \geq 2$ durch $(k-1)$ -faches integrieren die Gleichung

$$[\tilde{x} + n]_k = \frac{1}{(k-1)!} \sum_{l=1}^n (\tilde{x} + n - l)_+^{k-1} = \frac{1}{(k-1)!} \sum_{i=0}^{n-1} (\tilde{x} + i)^{k-1},$$

da wir die abgeschnittene Potenzfunktion $(\cdot)_+^{k-1}$ durch die Potenz $(\cdot)^{k-1}$, wegen $\tilde{x} + i \geq 0$ für alle $i = 0, \dots, n-1$ ersetzen können. Mit der ersten Beziehung (4.26) erhalten wir schließlich durch eine Teleskopsumme die Behauptung (4.27) für $x \geq 0$. Analog lässt sich die Beziehung (4.27) auch für $x \leq 0$ herleiten.

Die letzte Aussage über die Extrema der Bernoulli-Polynome $B_{2k}(\cdot)$ ist für $k = 1$ leicht nachzurechnen. Ansonsten sind für $m = 2k - 1$ mit $k \geq 2$ die einzigen Nullstellen der ungeraden Bernoulli-Polynome $B_m(\cdot)$ im Intervall $[0, 1]$ bei $\{0, \frac{1}{2}, 1\}$, wie in [34, Abschnitt 3.3] nachzulesen. In diesem Buch sind die Bernoulli-Polynome $B_k(\cdot)$ zwar anders definiert, erfüllen aber auch die Eigenschaften der Definition (4.25) und stimmen daher überein. Ergo sind für $l = 2k$ die Extrema der geraden Bernoulli-Polynome $B_l(\cdot)$ an den Stellen $\{0, \frac{1}{2}, 1\}$. Ein Extremum ist damit $B_l(0) = B_l$. Weil auch das Polynom $\tilde{B}(x) := (-1)^k B_k(1-x)$ der Definition (4.25) genügt, haben wir $\tilde{B}_l(\cdot) = B_l(\cdot)$ und damit $B(1) = \tilde{B}(0) = B_l$. Für die Identität $B_k(\frac{1}{2}) = (2^{1-k} - 1) B_k$ verweisen wir auf [1, Formel (23.1.21)]. Damit sind dann alle Aussagen bewiesen. \square

Mit der Beziehungen (4.27) aus Lemma 4.11 und der Definition (4.25) erhalten wir für $x \in \mathbb{R}$ und $r \geq 1$ die Identität

$$\begin{aligned} \frac{1}{(r+1)!} \frac{\partial}{\partial x} B_{r+1}(x - [x]) &= [x]_{r+1}' - \frac{1}{(r+1)!} B_{r+1}'(x) \\ &= [x]_r - \frac{1}{r!} B_r(x) = \frac{1}{r!} B_r(x - [x]). \end{aligned} \quad (4.28)$$

Für $x \in \mathbb{R}$ haben wir mit der obigen Identität, der Beziehung $x - [x] - \frac{1}{2} = B_1(x - [x])$ sowie der Integraldarstellung (4.23) aus Lemma 4.10 alle nötigen Aussagen zusammen um die berühmte Euler-Maclaurinsche Summenformel zu beweisen, auf der unsere weiteren Ergebnisse fußen.

Satz 4.12. Sei für $r \in \mathbb{N}$ eine Funktion $g \in C_0^{(r-1)}[0, 1]$ gegeben, deren $(r-1)$ -te Ableitung sich als Integral über eine absolut Riemann-integrierbare Funktion $g^{(r)}$ als $g^{(r-1)}(x) = g^{(r-1)}(0) + \int_0^x g^{(r)}(t) dt$ für $x \in [0, 1]$ darstellen lässt, so gilt für $N \in \mathbb{N}$ die Euler-Maclaurinsche Summenformel

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) &= \frac{g(0) + g(1)}{2} + N \int_0^1 g(t) dt + \sum_{k=2}^r \left(\frac{-1}{N}\right)^{k-1} \frac{B_k}{k!} \left(g^{(k-1)}(0) - g^{(k-1)}(1)\right) \\ &\quad + \left(\frac{-1}{N}\right)^{r-1} \int_0^1 \frac{B_r(Nt - [Nt])}{r!} g^{(r)}(t) dt. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Ist ferner $g^{(r)} \in \mathcal{BV}[0, 1]$, so gilt mit Hilfe des Stieltjes-Integrals die Verallgemeinerung

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) &= \frac{g(0) + g(1)}{2} + N \int_0^1 g(t) dt + \sum_{k=2}^{r+1} \left(\frac{-1}{N}\right)^{k-1} \frac{B_k}{k!} \left(g^{(k-1)}(0) - g^{(k-1)}(1)\right) \\ &\quad + \left(\frac{-1}{N}\right)^r \int_0^1 \frac{B_{r+1}(Nt - [Nt])}{(r+1)!} dg^{(r)}(t). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Beweis. Mit der Beziehung (4.23) aus Lemma 4.10 erhalten wir für $c = \frac{1}{2}$ und der Identität $x - \lfloor x \rfloor - \frac{1}{2} = B_1(x - \lfloor x \rfloor)$ die Gleichung

$$\sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) = \frac{g(1) + g(0)}{2} + N \int_0^1 g(t) dt + \int_0^1 B_1(Nt - \lfloor Nt \rfloor) g'(t) dt.$$

Auf der letzten Aussage aufbauend erhalten wir für $r \in \mathbb{N}$ mit $(r-1)$ -facher partieller Integration des Restintegrals $\int_0^1 B_1(Nt - \lfloor Nt \rfloor) g'(t) dt$ und der Identität (4.28) die Gleichung

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) &= \frac{g(0) + g(1)}{2} + N \int_0^1 g(t) dt + \sum_{k=2}^r \left(\frac{-1}{N}\right)^{k-1} \frac{B_k(0)}{k!} \left(g^{(k-1)}(0) - g^{(k-1)}(1)\right) \\ &\quad + \left(\frac{-1}{N}\right)^{r-1} \int_0^1 \frac{B_r(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{r!} g^{(r)}(t) dt. \end{aligned}$$

Wodurch wir mit $B_k(0) = B_k$, $k \in \mathbb{N}$, die Aussage (4.29) erhalten. Gilt nun zusätzlich $g^{(r)} \in \mathcal{BV}[0, 1]$, dann existiert nach [10, Nr. 575] das Stieltjes-Integral auf der linken Seite der folgenden Gleichungen. Daraus folgt mit der Regel der partiellen Integration [10, Nr. 577] sowie der Verbindung zum Riemann-Integral [10, Nr. 579] die Beziehungen

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{B_{r+1}(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{(r+1)!} dg^{(r)}(t) &= \frac{B_{r+1}(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{(r+1)!} g^{(r)}(t) \Big|_{t=0}^1 - \int_0^1 g^{(r)}(t) d\frac{B_{r+1}(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{(r+1)!} \\ &= -\frac{B_{r+1}(0)}{(r+1)!} \left(g^{(r)}(0) - g^{(r)}(1)\right) - N \int_0^1 g^{(r)}(t) \frac{B_r(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{r!} dt. \end{aligned}$$

Stellen wir nun die obigen Gleichungen nach dem Integral $\int_0^1 g^{(r)}(t) \frac{B_r(Nt - \lfloor Nt \rfloor)}{r!} dt$ um und setzen die dadurch erhaltene Beziehung in die Identität (4.29) ein, so erhalten wir die zweite Aussage (4.30). \square

Mit der verallgemeinerten Euler-Maclaurinschen Summenformel lassen sich nun Schranken für $\|g\|_{1,N}$ von nichtnegativen Funktionen $g \in \mathcal{BV}_0^r[0, 1]$ angeben.

Satz 4.13. Sei $g \in \mathcal{BV}_0^r[0, 1]$, $r \in \mathbb{N}$, und g nichtnegativ, dann gelten mit

$$b_r := \frac{1}{2} \left(\max_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) - \min_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) \right)$$

für $N \in \mathbb{N}$ die Schranken

$$N \left(\|g\|_1 - \frac{b_r}{(r+1)!N^{r+1}} \left| g^{(r)} \Big|_V \right. \right) \leq \|g\|_{1,N} \leq N \left(\|g\|_1 + \frac{b_r}{(r+1)!N^{r+1}} \left| g^{(r)} \Big|_V \right. \right). \quad (4.31)$$

Beweis. Für $g \in \mathcal{BV}_0^r[0, 1]$ gelten die Bedingungen $g^{(r')}(0) = g^{(r')}(1) = 0$ für $r' = 0, \dots, r$. Damit folgen mit Hilfe der verallgemeinerten Euler-Maclaurinschen Summenformel (4.30) für beliebiges $c \in \mathbb{R}$ die Gleichungen

$$\begin{aligned} \|g\|_{1,N} &= \sum_{k=0}^N g\left(\frac{k}{N}\right) \\ &= N \int_0^1 g(t) dt + \left(\frac{-1}{N}\right)^r \int_0^1 \frac{B_{r+1}(Nt - \lfloor Nt \rfloor) + c}{(r+1)!} dg^{(r)}(t) - \left(\frac{-1}{N}\right)^r \int_0^1 \frac{c}{(r+1)!} dg^{(r)}(t). \end{aligned}$$

Durch partielle Integration erhalten wir für das hintere Stieltjes-Integral der letzten Gleichung mit der Beziehung $g^{(r)}(1) = g^{(r)}(0)$ die Aussage

$$\int_0^1 \frac{c}{(r+1)!} dg^{(r)}(t) = \frac{c}{(r+1)!} (g^{(r)}(1) - g^{(r)}(0)) = 0.$$

Womit sich mit der Beziehung [10, Nr. 582] zwischen dem Stieltjes-Integral und der totalen Variation einer Funktion die folgenden Abschätzungen

$$\begin{aligned} \|g\|_{1,N} &\geq N \int_0^1 g(t) dt - \left| \left(\frac{-1}{N} \right)^r \int_0^1 \frac{B_{r+1}(Nt - \lfloor Nt \rfloor) + c}{(r+1)!} dg^{(r)}(t) \right| \\ &\geq N \int_0^1 g(t) dt - \frac{\|B_{r+1}(N \cdot - \lfloor N \cdot \rfloor) + c\|_\infty}{N^r (r+1)!} |g^{(r)}|_V \end{aligned}$$

ergeben. Wählen wir nun

$$c := -\frac{1}{2} \left(\min_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) + \max_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) \right),$$

so folgt die untere Abschätzung der Behauptung (4.31). Analog gehen wir für die obere Abschätzung vor. \square

Durch die enge Beziehung der Bernoulli-Zahlen B_k zur Zetafunktion ζ können wir einen bemerkenswerten Zusammenhang zwischen dem im Satz 4.13 angegebenen Resultat und der in [21, Lemma 3.2] enthaltenen Abschätzung beobachten, obwohl beide Ergebnisse auf sehr unterschiedliche Art und Weise erzielt worden sind.

Folgerung 4.14. Sei $g \in \mathcal{BV}_0^{l-1}[0, 1]$, $l \in 2\mathbb{N}$, und g nichtnegativ, dann gilt die Abschätzung

$$N \left(\|g\|_1 - \left(1 - \frac{1}{2^l} \right) \frac{2\zeta(l)}{(2\pi N)^l} |g^{(l-1)}|_V \right) \leq \|g\|_{1,N} \leq N \left(\|g\|_1 + \left(1 - \frac{1}{2^l} \right) \frac{2\zeta(l)}{(2\pi N)^l} |g^{(l-1)}|_V \right). \quad (4.32)$$

Beweis. Für $r = l - 1$ sind in Lemma 4.11 die Extrema der geraden Bernoulli-Polynome $B_{r+1}(\cdot)$ des Intervalls $[0, 1]$ angegeben. Damit gilt für die halbe Differenz b_r der Extrema die Beziehung

$$b_r = \frac{1}{2} \left(\max_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) - \min_{x \in [0,1]} B_{r+1}(x) \right) = \frac{1}{2} \left| B_l - \left(\frac{1}{2^{l-1}} - 1 \right) B_l \right| = \left(1 - \frac{1}{2^l} \right) |B_l|.$$

Mit dem Satz 4.13 und der berühmten Eulerschen Formel [19, Abschnitt 15.4]

$$\zeta(l) = \frac{(2\pi)^l |B_l|}{2l!}$$

zur Auswertung der Zetafunktion für positive gerade Zahlen folgt die Behauptung (4.32). \square

Die hier erreichte Konstante am Abfallterm der Abschätzung (4.32) für $r = l - 1$, $l \in 2\mathbb{N}$, ist damit um den Faktor $(1 - \frac{1}{2^l})$ besser als mit der Abschätzung in [21, Lemma 3.2].

4.1.3 Konstruktion mittels perfekter B-Splines

Jetzt sind wir endlich bereit sehr gut lokalisierte trigonometrische Polynome K mit Hilfe „genügend glatter“ Gewichte $\mathbf{w}_N \in \mathbb{R}^{2N+1}$, $N \in \mathbb{N}_0$, zu konstruieren. Dazu werden wir für $\beta \in \mathbb{N}$ einen besonderen Spline $S_\beta \in \mathcal{S}_0^\beta([-1, 1])$ abtasten. Dieser ist bis auf Normierung die Lösung des Optimierungsproblems [30, Theorem 2]

$$\min_{g \in \mathcal{BV}_0^\beta([-1, 1])} \|g^{(\beta)}\|_\infty, \text{ sodass } \|g\|_1 = 1 \quad (4.33)$$

und wird perfekter B-Spline vom Grad β genannt. Wir führen hier einen recht elementaren Beweis, der die für uns benötigten Eigenschaften dieser Splines liefert. In [30] werden diese Eigenschaften mit Hilfe dividierter Differenzen und des Peano-Kern-Satzes [3, Satz 3.1] erzielt.

Satz 4.15. Für $\beta \in \mathbb{N}$ ist die Funktion

$$S_\beta(x) := \frac{(-1)^\beta}{(\beta-1)!} \int_{-1}^x \sum_{k=0}^{\beta} (-1)^k \chi_{\left(\cos \frac{k+1}{\beta+1}\pi, \cos \frac{k}{\beta+1}\pi\right]}(t) (x-t)^{\beta-1} dt \quad (4.34)$$

ein gerader, positiver Spline vom Grad β mit $\text{supp}(S_\beta) = [-1, 1]$ und $\|S_\beta\|_1 = \frac{1}{\beta!2^{\beta-1}}$.

Beweis. Für $k \in \mathbb{N}_0$ mit $0 \leq k \leq \beta+1$ sei $f_k(x) : [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ mit Hilfe des Chebyshev-Polynoms U_β zweiter Art durch

$$\begin{aligned} f_0(x) &:= (-1)^\beta \text{sign}(U_\beta(x)) \quad \text{und} \\ f_k(x) &:= \int_{-1}^x f_{k-1}(t) dt \quad \text{für } k > 0 \end{aligned} \quad (4.35)$$

definiert. Im Folgendem zeigen wir mittels vollständiger Induktion über k mit Hilfe des Satzes von Fubini die Beziehung

$$f_k(x) = \frac{(-1)^\beta}{(k-1)!} \int_{-1}^x (x-t)^{k-1} \text{sign}(U_\beta(t)) dt \quad \text{für } 1 \leq k \leq \beta+1. \quad (4.36)$$

Der Induktionsanfang für $k=1$ ergibt sich aus der Definition (4.35). Es gelte also die Eigenschaft (4.36) für $1 \leq k' \leq k-1$ mit festem $k \geq 2$, dann folgern wir mit Hilfe der Induktionsvoraussetzung

$$\begin{aligned} f_k(x) &= \int_{-1}^x f_{k-1}(y) dy = \int_{-1}^x \frac{1}{(k-2)!} \int_{-1}^y f_0(t) (y-t)^{k-2} dt dy \\ &= \frac{1}{(k-2)!} \int_{-1}^x f_0(t) \int_t^x (y-t)^{k-2} dy dt \\ &= \frac{1}{(k-1)(k-2)!} \int_{-1}^x f_0(t) (x-t)^{k-1} dt \end{aligned}$$

und ziehen den Induktionsschluss. Da nun aber für alle $x \in [-1, 1]$ nach der Identität (4.36) die Beziehung $S_\beta(x) = f_\beta(x)$ gilt (vgl. Beweis von Satz 2.2), ist wegen der Definition (4.35) die Gleichung

$$S_\beta^{(n)}(x) = f_{\beta-n}(x) \quad \text{für } 0 \leq n \leq \beta$$

erfüllt. Mit Satz 2.2 erhalten wir für die Randpunkte $\{-1, 1\}$ für $0 \leq n \leq \beta$ die Funktionswerte

$$\begin{aligned} S_\beta^{(n)}(1) &= \frac{1}{(\beta-1-n)!} \int_{-1}^1 (1-t)^{\beta-1-n} \text{sign}(U_\beta(t)) dt = 0, \\ S_\beta^{(n)}(-1) &= 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Damit folgt nun aber, wie im Folgendem leicht einzusehen, dass für den Träger

$$\text{supp } S_\beta^{(n)} = [-1, 1] \quad \text{für alle } 0 \leq n \leq \beta \quad (4.38)$$

gilt. Aufgrund der Beziehung $S_\beta^{(\beta)} = f_0$ ist das für $n = \beta$ klar. Angenommen es existiere für ein $0 \leq \tilde{n} < \beta$ eine dichte Teilmenge D eines Intervalls $[a, b] \subset [-1, 1]$ mit $S_\beta^{(\tilde{n})}(D) = 0$, so wäre auch $S_\beta^{(\beta)}([a, b]) = 0$ aufgrund der Stetigkeit von $S_\beta^{(\tilde{n})}$.

Mit den Beziehungen (4.37) und (4.38) können wir nun die Positivität von $S_\beta(x)$ für $x \in (-1, 1)$ folgern. Dazu nehmen wir das Gegenteil an. Somit existieren Punkte $x, y \in (-1, 1)$ mit $S_\beta(x)S_\beta(y) < 0$, wodurch S_β in $(-1, 1)$ aufgrund des Zwischenwertsatzes mindestens eine Nullstelle hat. Mit dem Satz von Rolle folgt dann, dass $S_\beta^{(\beta-1)}$ mindestens β Nullstellen im Intervall $(-1, 1)$ besitzt. Woraus wir mit der Größe des Trägers $\text{supp } S_\beta^{(\beta-1)} = [-1, 1]$ folgern können, dass die stetige Funktion $S_\beta^{(\beta-1)}$ mindestens $\beta + 1$ Extrema in dem Intervall $(-1, 1)$ enthält. Damit setzt sich $S_\beta^{(\beta-1)}$ aus mindestens $\beta + 2$ stückweise linearen Funktionen, mit alternierenden Vorzeichen der Anstiege, zusammen. Dies widerspricht aber der Funktion f_0 , welche nur aus der Linearkombination $\beta + 1$ verschiedener disjunkter charakteristischer Funktionen besteht. Sei nun $\tilde{x} \in \left(-1, \cos\left(\frac{\beta}{\beta+1}\pi\right)\right]$, so ist auch $S_\beta(\tilde{x}) > 0$, wegen $f_0(\tilde{x}) > 0$.

Aufgrund der Positivität des Splines S_β erhalten wir mit dem Satz 2.2 die Gleichungen

$$\begin{aligned} \|S_\beta\|_1 &= \int_{-1}^1 f_\beta(t) dt = f_{\beta+1}(1) = \frac{(-1)^\beta}{\beta!} \int_{-1}^1 (1-t)^\beta \text{sign}(U_\beta(t)) dt \\ &= \frac{1}{\beta!} \int_{-1}^1 t^\beta \text{sign}(U_\beta(t)) dt = \frac{1}{\beta! 2^{\beta-1}} \end{aligned}$$

und damit die Behauptung über die Größe der Integralnorm $\|S_\beta\|_1$. \square

In den Arbeiten [21, 18] wurde bei der Konstruktion gut lokalisierter trigonometrischer Polynome auf die gestauchten kardinalen B-Splines $\tilde{N}_{\beta+1}(\cdot) = N_{\beta+1}(\beta \cdot) \in \mathcal{S}_0^\beta\left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]\right)$, $\beta \in \mathbb{N}$, zurückgegriffen. Mit den perfekten B-Splines erreichen wir jedoch besser lokalisierte Polynome. Dazu betrachten wir den gestauchten perfekten B-Spline $\tilde{S}_\beta(\cdot) := S_\beta(2 \cdot) \in \mathcal{S}_0^\beta\left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]\right)$. Für die totale Variation der β -ten verallgemeinerten Ableitung $\tilde{S}_\beta^{(\beta)}(\cdot)$ gilt dann die Beziehung

$$\left| \tilde{S}_\beta^{(\beta)}(\cdot) \right|_V = 2^\beta \left| S_\beta^{(\beta)}(2 \cdot) \right|_V = 2^\beta \left| S_\beta^{(\beta)}(\cdot) \right|_V$$

und mit dem Satz 4.15 erhalten wir die Gleichung

$$\left| \tilde{S}_\beta^{(\beta)}(\cdot) \right|_V = 2^\beta 2(\beta + 1) = (\beta + 1) 2^{\beta+1} \quad (4.39)$$

sowie die Norm

$$\left\| \tilde{S}_\beta(\cdot) \right\|_1 = \frac{1}{2} \|S_\beta(\cdot)\|_1 = \frac{1}{2(\beta)! 2^{\beta-1}}. \quad (4.40)$$

Es gelten somit die Gleichungen

$$\left| \frac{\tilde{S}_\beta^{(\beta)}}{\left\| \tilde{S}_\beta \right\|_1} \right|_V = 2(\beta + 1)! 4^\beta, \quad \left| \frac{\tilde{N}_{\beta+1}^{(\beta)}}{\left\| \tilde{N}_{\beta+1} \right\|_1} \right|_V = (2(\beta + 1))^{\beta+1}$$

für die normierten Splines $\frac{\tilde{S}_\beta^{(\beta)}}{\left\| \tilde{S}_\beta \right\|_1}, \frac{\tilde{N}_{\beta+1}^{(\beta)}}{\left\| \tilde{N}_{\beta+1} \right\|_1} \in \mathcal{S}_0^\beta\left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]\right)$ (vgl. [21, Corollar 3.5]). Nach Satz 4.9 hängt die Lokalisierung des trigonometrischen Polynoms (4.10) stark von der totalen Variation ab. Wir werden deswegen zur Konstruktion gut lokalisierter trigonometrischer Polynome die perfekten B-Splines S_β anstatt der kardinalen B-Splines $N_{\beta+1}$ benutzen.

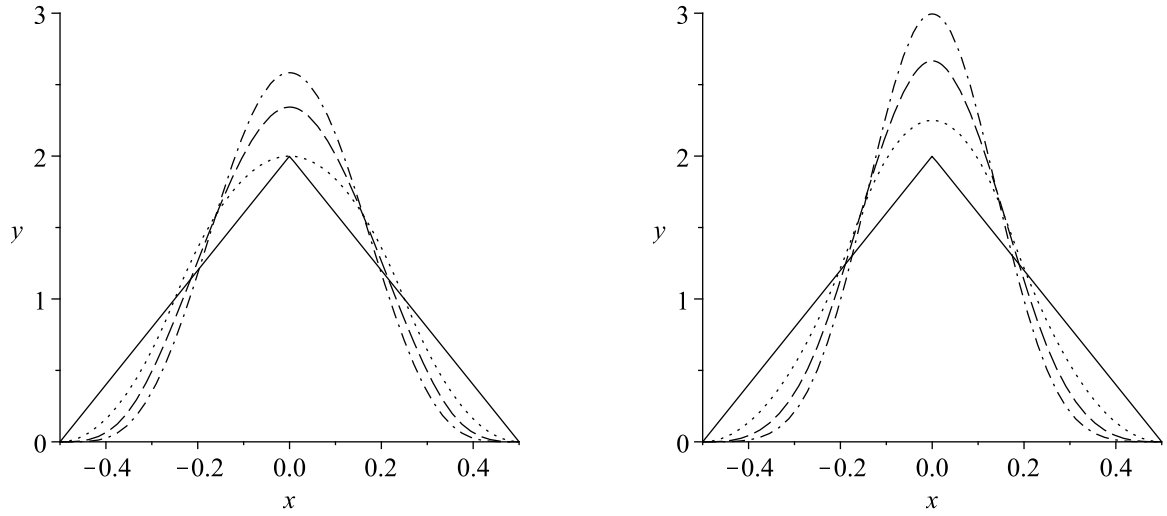


Abbildung 4.1: Links sind die gestauchten und normierten perfekten B-Splines vom Grad 1 (—), 2 (···), 3 (- -), 4 (-·-) und rechts die gestauchten und normierten kardinalen B-Splines vom Grad 1 (—), 2 (···), 3 (- -), 4 (-·-) dargestellt.

Folgerung 4.16. Sei für $N \in \mathbb{N}_0$ und $\beta \in 2\mathbb{N}$ das trigonometrische Polynom

$$K(x) := \sum_{k=-N}^N \frac{1}{\|S_{\beta-1}\|_{1,N+1}} S_{\beta-1} \left(\frac{k}{N+1} \right) e^{2\pi i k x}$$

mit dem abgetasteten perfekten B-Spline vom Grad $\beta-1$ gegeben, so gilt für $x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$|K(x)| \leq \frac{c_{\beta,N}}{|x|^\beta} \quad \text{mit } c_{\beta,N} = \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta} \left(1 - \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta} \right)^{-1}. \quad (4.41)$$

Beweis. Mit der Abtastfolge $w = \left(S_{\beta-1} \left(\frac{k}{N+1} \right) \right)_{k \in \mathbb{Z}}$ erhalten wir für das trigonometrische Polynom K mit der Gleichung (4.39) und dem Satz 4.9 der kontinuierlichen Variante für $x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \setminus \{0\}$ die Abschätzung

$$|K(x)| = \frac{1}{\|w_N\|_1} \sum_{k=-N}^N \tilde{S}_{\beta-1} \left(\frac{k}{2(N+1)} \right) e^{2\pi i k x} \leq \frac{1}{\|w_N\|_1} \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta 2^\beta}{(4(N+1))^{\beta-1} |2\pi x|^\beta}. \quad (4.42)$$

Mit der Folgerung 4.14, den Beziehungen (4.40) und (4.39) gilt wegen $\|\tilde{S}_\beta(\cdot)\|_1 = \|\tilde{S}_\beta(\cdot - \frac{1}{2})\|_1$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} \|w_N\|_1 &= \|S_{\beta-1}(\cdot)\|_{1,N+1} = \|\tilde{S}_{\beta-1}(\cdot)\|_{1,2(N+1)} = \left\| \tilde{S}_{\beta-1} \left(\cdot - \frac{1}{2} \right) \right\|_{1,2(N+1)} \\ &\geq 2(N+1) \left(\frac{1}{(\beta-1)!2^{\beta-1}} - \left(1 - \frac{1}{2^\beta} \right) \frac{2\zeta(\beta)}{(4\pi(N+1))^\beta} \beta 2^\beta \right) \\ &= \frac{N+1}{(\beta-1)!2^{\beta-2}} \left(1 - \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta} \right). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Zusammen mit (4.42) erhalten wir die Behauptung. \square

4.2 Stabilität

Mit den in den vorigen Abschnitten erarbeiteten Ergebnissen lassen sich nun Abschätzungen der Konditionszahl $\kappa(\mathbf{K})$ der Systemmatrix \mathbf{K} für Interpolationsaufgaben (4.1) mit speziellen Gewichten $\hat{\mathbf{w}}_N$ angeben.

Satz 4.17. Sei $q \in (0, \pi]$ und $\mathcal{X} \in \mathcal{SO}(3)$ eine q -separierte Abtastmenge der Kardinalität $M \in \mathbb{N}$. Des Weiteren seien $N \in \mathbb{N}, \beta \in 2\mathbb{N}$ mit $\beta - 1 \geq 3$ und die Gewichte

$$\hat{w}_l := \frac{1}{\|S_{\beta-1}\|_{1,N+1}} \left(S_{\beta-1} \left(\frac{l}{N+1} \right) - S_{\beta-1} \left(\frac{l+1}{N+1} \right) \right) \quad \text{für } l \in \mathbb{N}_0 \text{ und } l \leq N,$$

welche durch Abtasten des perfekten B-Spline $S_{\beta-1}$ vom Grad $\beta-1$ entstehen, gegeben. Dann gelten für die Eigenwerte $\lambda_1(\mathbf{K}) \leq \dots \leq \lambda_M(\mathbf{K})$ der Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H \in \mathbb{R}^{M \times M}$ der Normalgleichung (4.3) des Interpolationsproblems (4.1) die Abschätzungen

$$\begin{aligned} 1 \geq \lambda_1(\mathbf{K}) &\geq 1 - c_\beta \frac{48\zeta(\beta-2) + 48\zeta(\beta-1) + 24\zeta(\beta)}{(q(N+1))^\beta}, \\ 1 \leq \lambda_M(\mathbf{K}) &\leq 1 + c_\beta \frac{48\zeta(\beta-2) + 48\zeta(\beta-1) + 24\zeta(\beta)}{(q(N+1))^\beta} \\ \text{mit } c_\beta &= (2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta! \left(1 - \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Insbesondere hat die $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ vollen Zeilenrang M , falls für den Polynomgrad

$$N+1 \geq \frac{16}{q} \quad (4.45)$$

gilt. Die Bedingung (4.45) ist sogar optimal in dem Sinne, dass eine q -separierte Abtastmenge \mathcal{X}_q mit Kardinalität M existiert, für welche die entsprechende $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix \mathbf{D} zum Polynomgrad

$$N+1 \leq \frac{12}{5q} \quad (4.46)$$

keinen vollen Zeilenrang M hat.

Beweis. Für die Systemmatrix $\mathbf{K} = (k_{i,j})_{i,j=0,\dots,M-1}$ haben wir mit der Gleichungen (4.5) und (4.7) aus dem Lemma 4.1 den Bezug zum trigonometrischen Polynom

$$K_N(t) := \sum_{k=-N}^N \sum_{l=|k|}^N \hat{w}_l e^{ikt} = \sum_{k=-N}^N \frac{1}{\|S_{\beta-1}\|_{1,N+1}} S_{\beta-1} \left(\frac{k}{N+1} \right) e^{ikt}$$

hergestellt. Dadurch können wir die Lokalisierungseigenschaft (4.41) anwenden, um für die Systemmatrix \mathbf{K} eine Abschätzung der Nebendiagonalelemente zu bekommen. Mit der Substitution $t = 2\pi x, x \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}] \setminus \{0\}$, erhalten wir die obere Schranke

$$\begin{aligned} |K_N(t)| &= \sum_{k=-N}^N \frac{1}{\|S_{\beta-1}\|_{1,N+1}} S_{\beta-1} \left(\frac{k}{N+1} \right) e^{2\pi i k x} \\ &\leq \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(t(N+1))^\beta} \left(1 - \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

Für die Abschätzung der Eigenwerte $\lambda_r(\mathbf{K})$, $r = 1, \dots, M$, besagt der Satz von Gershgorin [17, Kapitel 6], dass zu jedem r ein $j = 0, \dots, M - 1$ existiert, für das die Ungleichung

$$|\lambda_r(\mathbf{K}) - k_{j,j}| \leq \sum_{\substack{i=0 \\ i \neq j}}^{M-1} |K_N(d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j))|$$

erfüllt ist. Also folgt mit der letzten Abschätzung, der Ungleichung (4.47) und der Schranke (3.8) für die Anzahl der Elemente des m -ten Ringes $|R_{\mathcal{X},q,m}|$ einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} aus Lemma 3.1 die Aussage

$$\begin{aligned} |\lambda_r(\mathbf{K}) - 1| &\leq \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} |R_{\mathcal{X},q,m}| \max_{\mathbf{G} \in R_{\mathcal{X},q,m}} |K_N(d(\mathbf{I}, \mathbf{G}))| \\ &\leq \sum_{m=1}^{\infty} (48m^2 + 48m + 24) |K_N(mq)| \\ &\leq \sum_{m=1}^{\infty} (48m^2 + 48m + 24) \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(mq(N+1))^\beta} \left(1 - \frac{(2^\beta - 1)\zeta(\beta)\beta!}{(2\pi(N+1))^\beta}\right)^{-1} \\ &\leq c_\beta \frac{48\zeta(\beta - 2) + 48\zeta(\beta - 1) + 24\zeta(\beta)}{(q(N+1))^\beta} \end{aligned}$$

zur Abschätzung der Eigenwerte. Mit diesem Resultat und der Beziehung

$$\sum_{i=1}^M \lambda_i(\mathbf{K}) = \text{Spur}(\mathbf{K}) = \sum_{i=1}^M K_N(0) = M$$

erhalten wir die Schranken (4.44) für den kleinsten und größten Eigenwertes $\lambda_1(\mathbf{K})$ und $\lambda_M(\mathbf{K})$. Mit $N \geq 1$ und $\beta = 4$ gilt für die Konstante $c_\beta < 400$ und für die Konstante $48\zeta(\beta - 2) + 48\zeta(\beta - 1) + 24\zeta(\beta) < 163$ aus Beziehung (4.44). Somit erhalten wir die Behauptung (4.45), weil dann mit der Invertierbarkeit der Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H$ die $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix \mathbf{D} vollen Spaltenrang besitzen muss.

Um die Optimalität der Bedingung (4.45) zu zeigen, betrachten wir die Abschätzung über die Anzahl der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten bzw. der Spalten der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix \mathbf{D}

$$d_N = \frac{1}{6}(2N+1)(2N+2)(2N+3) \leq \frac{4}{3}(N+1)^3 \leq \frac{56}{3q^3}.$$

Mit dieser Abschätzung und der Bedingung (4.46) erhalten wir für eine q -separierte Abtastmenge \mathcal{X}_q , die der Ungleichung (3.7) aus Lemma 3.1 genügt, die Schranke

$$d_N \leq \frac{56}{3q^3} < \frac{6\pi}{q^3} \leq M.$$

□

4.2.1 Minimale 2-Norm Interpolation

Wir betrachten nun die Interpolationsaufgabe, bei der ein Polynom $f^* \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ vom Grad $N \in \mathbb{N}_0$ mit minimaler 2-Norm $\|f^*\|_2$ gesucht ist, welches für eine Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$, $M \in \mathbb{N}$, die Werte $y_i \in \mathbb{C}$ für $i = 0, \dots, M - 1$ interpoliert. Es ist somit das konvexe Optimierungsproblem

$$\min_{f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))} \|f\|_2, \text{ sodass } f(\mathbf{G}_i) = y_i \quad \text{für } i = 0, \dots, M - 1 \quad (4.48)$$

zu lösen. Dieses Problem ist aufgrund der Parsevalschen Gleichung (2.20) äquivalent zu dem streng konvexen Optimierungsproblem

$$\min_{\hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \sum_{(l,k,k') \in J_N} \frac{|\hat{f}_l^{k,k'}|^2}{2l+1}, \quad \text{sodass} \quad \sum_{(l,k,k') \in J_N} \hat{f}_l^{k,k'} D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) = y_i \quad \text{für } i = 0, \dots, M-1, \quad (4.49)$$

welches dem Problem (4.1) mit den Gewichten $\hat{\mathbf{w}}_N := (\hat{w}_0, \dots, \hat{w}_N)^T \in \mathbb{R}_+^{N+1}$ und $\hat{w}_l = 2l+1$ für $l = 0, \dots, N$ entspricht. Zur Bestimmung der Kondition des obigen Problems (4.49) untersuchen wir ohne Beschränkung der Allgemeinheit die Kondition der normierten Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H$ mit der Gewichtsmatrix $\hat{\mathbf{W}} = \text{diag}(\hat{\mathbf{w}})$ des Vektors $\hat{\mathbf{w}} := \frac{1}{d_N}(\hat{w}_l)_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{R}_+^{d_N}$. Um eine bzgl. des Polynomgrads asymptotisch optimale Abschätzung zu erhalten, werden wir die „schönen“ Gewichte aus Satz 4.17 benutzen.

Lemma 4.18. Seien für $N \in \mathbb{N}_0$ die Gewichte $\tilde{\mathbf{w}}_N = (\tilde{w}_0, \dots, \tilde{w}_N)^T \in \mathbb{R}_+^{N+1}$ mit

$$\tilde{w}_l := \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \left(S_3 \left(\frac{l}{N+1} \right) - S_3 \left(\frac{l+1}{N+1} \right) \right) \quad \text{für } l = 0, \dots, N$$

durch Abtasten des perfekten B-Splines S_3 gegeben. Dann gilt für $l = 0, \dots, N$ die obere Abschätzung

$$\tilde{w}_l \leq \frac{24(\sqrt{2}-1)(l+1)}{(N+1)^3} \left(1 - \frac{1}{4(N+1)^4} \right)^{-1} \quad (4.50)$$

sowie für $l = 0, \dots, \lfloor \frac{1}{4}(N+1) \rfloor$ mit $N \geq 4$ die untere Schranke

$$\tilde{w}_l \geq \frac{4(\sqrt{2}-1)(l+1)}{(N+1)^3} \left(1 + \frac{1}{4(N+1)^4} \right)^{-1}. \quad (4.51)$$

Beweis. Aus dem Beweis der Folgerung 4.16 erhalten wir mit der Ungleichung (4.43) die Abschätzungen

$$\frac{24}{N+1} \left(1 + \frac{1}{4(N+1)^4} \right)^{-1} \leq \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \leq \frac{24}{N+1} \left(1 - \frac{1}{4(N+1)^4} \right)^{-1}. \quad (4.52)$$

Mit der Darstellung

$$S_3(x) = \begin{cases} \frac{1}{6}(x^3 + 3(1-\sqrt{2})x^2 + 1 - \frac{\sqrt{2}}{2}) & \text{für } 0 \leq x \leq \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ \frac{1}{6}(1-x)^3 & \text{für } \frac{\sqrt{2}}{2} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

des perfekten B-Splines S_3 ergibt sich für die Gewichte $\tilde{\mathbf{w}}_N$ mit $0 \leq l < (N+1)\frac{\sqrt{2}}{2} - 1$ die explizite Formel

$$\tilde{w}_l = \frac{1}{6\|S_3\|_{1,N+1}} \left(\frac{(\sqrt{2}-1)(6l+3)}{(N+1)^2} - \frac{3l^2+3l+1}{(N+1)^3} \right).$$

Für $4 \leq N$ haben wir $\frac{1}{4}(N+1) \leq (N+1)\frac{\sqrt{2}}{2} - 1$ und zeigen im Folgendem für $0 \leq l \leq \frac{1}{4}(N+1)$ die Abschätzung

$$\frac{(\sqrt{2}-1)(6l+3)}{(N+1)^2} - \frac{3l^2+3l+1}{(N+1)^3} - \frac{l+1}{(N+1)^2} \geq 0.$$

Wegen $\sqrt{2} - 1 > \frac{2}{5}$ reicht es das Polynom

$$P(l) := \frac{2(6l+3)}{5(N+1)^2} - \frac{3l^2+3l+1}{(N+1)^3} - \frac{l+1}{(N+1)^2}$$

in l zu untersuchen. Die Nullstellen des Polynoms $P \in \Pi_2(\mathbb{R})$ sind dann

$$l_{1,2} = \left\{ \frac{7}{30}(N+1) - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{30} \sqrt{49(N+1)^2 - 150(N+1) - 75} \right\}$$

und es gilt wegen $N \geq 4$ die Beziehung

$$\begin{aligned} l_2 &= (N+1) \left(\frac{7}{30} - \frac{1}{2(N+1)} + \frac{1}{30} \sqrt{49 - \frac{150}{N+1} - \frac{75}{(N+1)^2}} \right) \\ &\geq (N+1) \left(\frac{7}{30} - \frac{3}{30} + \frac{1}{30} \sqrt{49 - 30 - 3} \right) = \frac{8}{30}(N+1) \\ &\geq \frac{1}{4}(N+1). \end{aligned}$$

Des Weiteren lässt sich mit einer kurzen Kurvendiskussion zeigen, dass die Nullstelle l_1 monoton fallend in N ist und damit gilt für $N \geq 4$ die Ungleichung

$$\begin{aligned} l_1 &= \frac{7}{30}(N+1) - \frac{1}{2} - \frac{1}{30} \sqrt{49(N+1)^2 - 150(N+1) - 75} \\ &\leq \frac{35}{30} - \frac{1}{2} - \frac{20}{30} = 0. \end{aligned}$$

Schließlich folgt mit $P(0) = \frac{N-4}{5(N+1)^3} \geq 0$ und der Beziehung (4.52) die Behauptung (4.51).

Für die obere Abschätzung (4.50) benutzen wir den Mittelwertsatz der Differentialrechnung und erhalten für $0 \leq l \leq N$ die Beziehung

$$S_3\left(\frac{l}{N+1}\right) - S_3\left(\frac{l+1}{N+1}\right) = -\frac{1}{N+1} S_3'(\xi_l) \quad \text{für ein } \xi_l \in \left(\frac{l}{N+1}, \frac{l+1}{N+1}\right). \quad (4.53)$$

Mit der Darstellung der Ableitung

$$S_3'(x) = \begin{cases} -\frac{1}{2}x(2(\sqrt{2}-1)-x) & \text{für } 0 \leq x \leq \frac{\sqrt{2}}{2}, \\ -\frac{1}{2}(x-1)^2 & \text{für } \frac{\sqrt{2}}{2} \leq x \leq 1 \end{cases}$$

können wir fallende Monotonie für $x \in [0, \sqrt{2}-1]$ nachweisen, wobei für $x = \sqrt{2}-1$ das Minimum im Intervall $[0, 1]$ angenommen wird. Außerdem erhalten wir die Beziehung $-S_3'(x) \geq 0$ für $x \in [0, 1]$. Somit ergibt sich für $x \in [0, \sqrt{2}-1]$ die Abschätzung

$$-S_3'(x) = \frac{1}{2}(2(\sqrt{2}-1)x - x^2) \leq (\sqrt{2}-1)x$$

sowie für $x \in [\sqrt{2}-1, 1]$ die Ungleichung

$$-S_3'(x) = \frac{1}{2}(x-1)^2 \leq \max_{\xi \in [0,1]} -S_3'(\xi) \leq (\sqrt{2}-1)x.$$

Zusammenfassend können wir die Gewichte \tilde{w}_l für $0 \leq l \leq N$ mit Hilfe der Gleichung (4.53) durch

$$\begin{aligned} \tilde{w}_l &= \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \left(S_3\left(\frac{l}{N+1}\right) - S_3\left(\frac{l+1}{N+1}\right) \right) \leq \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \max_{\xi_l \in [\frac{l}{N+1}, \frac{l+1}{N+1}]} -\frac{S_3'(\xi_l)}{N+1} \\ &\leq \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \max_{\xi_l \in [\frac{l}{N+1}, \frac{l+1}{N+1}]} \frac{\sqrt{2}-1}{N+1} \xi_l = \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \frac{(\sqrt{2}-1)(l+1)}{(N+1)^2} \end{aligned}$$

abschätzen und erhalten mit der Beziehung (4.52) die Behauptung (4.50). \square

Mit dem folgenden Satz werden wir sehen, dass wir auch die Kondition $\kappa(\mathbf{K})$ für eine fest gewählte q -separierte Abtastmenge \mathcal{X} beliebig klein halten können, wenn wir den Polynomgrad entsprechend groß wählen. Des Weiteren lässt sich auch für beliebiges $q \in (0, \pi]$ die Kondition $\kappa(\mathbf{K})$ für $(N+1)q \geq 16$ gleichmäßig abschätzen.

Satz 4.19. *Sei $q \in (0, \pi]$ und $\mathcal{X} \in \mathcal{SO}(3)$ eine q -separierte Abtastmenge der Kardinalität $M \in \mathbb{N}$. Dann gelten mit $2 \leq N \in \mathbb{N}$ für die Eigenwerte $\lambda_1(\mathbf{K}) \leq \dots \leq \lambda_M(\mathbf{K})$ der (normierten) Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H \in \mathbb{R}^{M \times M}$ der Normalengleichung (4.3) des Interpolationsproblems (4.49) die Abschätzungen*

$$\begin{aligned} 1 \geq \lambda_1(\mathbf{K}) &> \max \left\{ 1 - \frac{72\pi^2}{((N+1)q)^2} \left(\frac{\pi}{q} + \ln \left(\frac{\pi}{q} \right) + 2 \right), \frac{3}{40} \left(1 - \left(\frac{16}{q(N+1)} \right)^4 \right) \right\}, \\ 1 \leq \lambda_M(\mathbf{K}) &< \min \left\{ 1 + \frac{72\pi^2}{((N+1)q)^2} \left(\frac{\pi}{q} + \ln \left(\frac{\pi}{q} \right) + 2 \right), 58 \left(1 + \left(\frac{16}{q(4N+1)} \right)^4 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (4.54)$$

Beweis. Zunächst gehen wir zur Abschätzung des kleinsten und größten Eigenwerts $\lambda_1(\mathbf{K})$ bzw. $\lambda_M(\mathbf{K})$ wie im Beweis von Satz 4.17 vor, indem wir eine obere Schranke für den Abfall der Nebendiagonalelemente angeben, um dann den Satz von Gershgorin anzuwenden. Mit der Gleichung (4.7) aus Lemma 4.1 gilt für die Elemente der Systemmatrix \mathbf{K} die Beziehung

$$(\mathbf{K})_{i,j} = K_N(d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)) \quad \text{für } \mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j \in \mathcal{X} \text{ mit } K_N(t) = \frac{1}{d_N} \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt} \quad (4.55)$$

für den Gewichtsvektor $\mathbf{w}_N := (w_{-N}, \dots, w_N)$ mit den Gewichten $w_k := ((N+1)^2 - k^2)$ für $k = -N, \dots, N$. Mit der Identität $d_N = \sum_{k=-N}^N w_k$ gilt wieder $K_N(0) = 1$. Um den Satz 4.3 anwenden zu können, bestimmen wir die ℓ^1 -Norm der Differenz zweiter Ordnung der Folge $w := (w_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $w_k = 0$ für $|k| > N$. Für die erste Differenz Δw erhalten wir

$$(\Delta w)_k = w_k - w_{k-1} = \begin{cases} -2k + 1 & \text{für } -N \leq k \leq N+1, \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.56)$$

und damit für die zweite Differenz $\Delta^2 w$ die Beziehung

$$(\Delta^2 w)_k = (\Delta w)_k - (\Delta w)_{k-1} = \begin{cases} 2N+1 & \text{für } k = -N \text{ oder } k = N+2, \\ -2 & \text{für } -N+1 \leq k \leq N+1, \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

Somit gilt für $t \in [-\pi, \pi] \setminus \{0\}$ das folgende Abklingverhalten

$$\begin{aligned} K_N(t) &= \frac{1}{\|\mathbf{w}_N\|_1} \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt} \leq \frac{1}{d_N} \frac{\pi^2 \|\Delta^2 w\|_1}{4|t|^2} = \frac{6}{(2N+3)(2N+2)(2N+1)} \frac{\pi^2(2N+1)}{|t|^2} \\ &\leq \frac{3\pi^2}{2(N+1)^2 |t|^2} \end{aligned}$$

des trigonometrischen Polynoms K_N . Für $r = 1, \dots, M$ erhalten wir wie im Beweis von Satz 4.17 mit dem Satz von Gershgorin für q -separierte Abtastmengen \mathcal{X} mit $q \in (0, \pi]$ die

Abschätzung der Eigenwerte

$$\begin{aligned}
|\lambda_r(\mathbf{K}) - 1| &\leq \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} (48m^2 + 48m + 24) |K_N(mq)| \\
&\leq \frac{3\pi^2}{2((N+1)q)^2} \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} \left(48 + \frac{48}{m} + \frac{24}{m^2}\right) \\
&\leq \frac{72\pi^2}{((N+1)q)^2} \left(\frac{\pi}{q} + \left(\ln\left(\frac{\pi}{q}\right) + 1\right) + \frac{\pi^2}{12}\right)
\end{aligned}$$

und damit einen Teil der Behauptung (4.54).

Für den zweiten Teil werden wir die „schönen“ Gewichte aus Satz 4.17 für $\beta = 4$ benutzen, um mit Hilfe einer Vergleichsmethode optimale asymptotische Schranken zu erhalten. Die Abbildung 4.2 veranschaulicht unser Vorgehen. Mit den Gewichten $\tilde{\mathbf{w}}_N := (\tilde{w}_0, \dots, \tilde{w}_N)^T \in \mathbb{R}_+^{N+1}$ mit

$$\tilde{w}_l := \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \left(S_3\left(\frac{l}{N+1}\right) - S_3\left(\frac{l+1}{N+1}\right) \right)$$

des perfekten B-Splines S_3 werden wir eine untere Schranke des kleinsten Eigenwertes $\lambda_1(\mathbf{K})$ gewinnen. Für $\mathbf{c} = (c_0, \dots, c_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$ und die Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H$ mit der Identität (4.8) gilt die Beziehung

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{c} &= \sum_{l=0}^N \hat{w}_l \tilde{w}_l^{-1} \tilde{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\
&\geq \min_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \tilde{w}_r^{-1} \sum_{l=0}^N \tilde{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \quad (4.57) \\
&\geq \min_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \tilde{w}_r^{-1} \lambda_1(\mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) \mathbf{c}^H \mathbf{c}
\end{aligned}$$

mit der Diagonalmatrix $\tilde{\mathbf{W}} = \text{diag}(\tilde{\mathbf{w}})$ des Vektors $\tilde{\mathbf{w}} = (\tilde{w}_l)_{(l,k,k') \in J_N}$ und den Gewichten $\hat{\mathbf{w}}_N = (\hat{w}_0, \dots, \hat{w}_N)$ mit $\hat{w}_l = \frac{1}{d_N}(2l+1)$, $l = 0, \dots, N$. Um $\min_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \tilde{w}_r^{-1}$ nach unten abzuschätzen, benötigen wir die obere Schranke (4.50) aus Lemma 4.18 der Gewichte \tilde{w}_l für $l \in \mathbb{N}_0$ und $l \leq N$. Dadurch folgt für $N \geq 2$ die Abschätzung

$$\begin{aligned}
\min_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \tilde{w}_r^{-1} &= \min_{r=0,\dots,N} \frac{2r+1}{d_N} \frac{1}{\tilde{w}_r} \geq \min_{r=0,\dots,N} \frac{3(2r+1)}{4(N+1)^3} \frac{(N+1)^3 \left(1 - \frac{1}{4(N+1)^4}\right)}{24(\sqrt{2}-1)(r+1)} \\
&\geq \min_{r=0,\dots,N} \frac{(2r+1) \left(1 - \frac{1}{4(N+1)^4}\right)}{32(\sqrt{2}-1)(r+1)} = \frac{1 - \frac{1}{4(N+1)^4}}{32(\sqrt{2}-1)} \min_{r=0,\dots,N} 2 - \frac{1}{r+1} \\
&\geq \frac{1 - \frac{1}{4(N+1)^4}}{32(\sqrt{2}-1)} > \frac{3}{40},
\end{aligned}$$

aus der wir mit der Ungleichung (4.57) sowie Satz 4.17 und Lemma 4.2 eine untere Schranke

$$\lambda_1(\mathbf{K}) = \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^M \setminus \{0\}} \frac{\mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^H \mathbf{c}} \geq \frac{3}{40} \lambda_1(\mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) > \frac{3}{40} \left(1 - \left(\frac{16}{q(N+1)}\right)^4\right)$$

des kleinsten Eigenwertes der normierten Systemmatrix \mathbf{K} einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} erhalten. Um eine obere Schranke des größten Eigenwertes $\lambda_1(\mathbf{K})$ zu gewinnen, benutzen

wir die feiner abgetasteten Gewichte $\bar{\mathbf{w}}_{4N} := (\bar{w}_0, \dots, \bar{w}_{4N})^T \in \mathbb{R}_+^{4N+1}$ mit

$$\bar{w}_l := \frac{1}{\|S_3\|_{1,4N+1}} \left(S_3 \left(\frac{l}{4N+1} \right) - S_3 \left(\frac{l+1}{4N+1} \right) \right)$$

des perfekten B-Splines S_3 . Dann gilt für $\mathbf{c} = (c_0, \dots, c_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$ und der Systemmatrix $\mathbf{K} = \mathbf{D}\bar{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H$ mit der Identität (4.8) die Beziehung

$$\begin{aligned} \mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{c} &= \sum_{l=0}^N \hat{w}_l \bar{w}_l^{-1} \bar{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\ &\leq \max_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \bar{w}_r^{-1} \sum_{l=0}^N \bar{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\ &\leq \max_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \bar{w}_r^{-1} \sum_{l=0}^{4N} \bar{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \leq \max_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \bar{w}_r^{-1} \lambda_1(\mathbf{D}\bar{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) \mathbf{c}^H \mathbf{c} \end{aligned} \quad (4.58)$$

mit der Diagonalmatrix $\bar{\mathbf{W}} = \text{diag}(\bar{\mathbf{w}})$ des Vektors $\bar{\mathbf{w}} = (\bar{w}_l)_{(l,k,k') \in J_{4N}}$. Für eine obere Abschätzung von $\max_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \bar{w}_r^{-1}$ verwenden wir die untere Schranke (4.51) aus Lemma 4.18 der Gewichte \bar{w}_l für $l \in \mathbb{N}_0$ und $l \leq N \leq \lfloor \frac{1}{4}(4N+1) \rfloor$. Damit folgt die Abschätzung

$$\begin{aligned} \max_{r=0,\dots,N} \hat{w}_r \bar{w}_r^{-1} &= \max_{r=0,\dots,N} \frac{2r+1}{d_N} \frac{1}{\bar{w}_l} \leq \max_{r=0,\dots,N} \frac{3(2r+1)}{4(N+\frac{1}{4})^3} \frac{(4N+1)^3}{4(\sqrt{2}-1)(r+1)} \left(1 + \frac{1}{4(4N+1)^4} \right) \\ &\leq \frac{12}{\sqrt{2}-1} \left(1 + \frac{1}{4(4N+1)^4} \right) \max_{r=0,\dots,N} \frac{2r+1}{r+1} \\ &\leq \frac{24}{\sqrt{2}-1} \left(1 + \frac{1}{4(4N+1)^4} \right) < 58, \end{aligned}$$

aus der wir mit der Ungleichung (4.58) sowie Satz 4.17 und Lemma 4.2 eine obere Schranke

$$\lambda_M(\mathbf{K}) = \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^M \setminus \{\mathbf{0}\}} \frac{\mathbf{c}^H \mathbf{K} \mathbf{c}}{\mathbf{c}^H \mathbf{c}} \leq 58 \lambda_M(\mathbf{D}\bar{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) < 58 \left(1 + \left(\frac{16}{q(4N+1)} \right)^4 \right)$$

des größten Eigenwertes der normierten Systemmatrix \mathbf{K} einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} erhalten. \square

Bemerkung 4.20. Das Interpolationsproblem (4.48) können wir über das lineare Gleichungssystem (4.3) mit Hilfe einer faktorisierte Variante des CG-Verfahrens lösen, in welchem wir die nichtäquidistante $\mathcal{SO}(3)$ -FFT [26] für schnelle Matrixvektormultiplikationen der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix \mathbf{D} und ihrer adjungierten \mathbf{D}^H benutzen. Bezeichnen wir mit $\epsilon \in \mathbb{R}_+$ die geforderte relative Genauigkeit zur Lösung $\tilde{\mathbf{f}}^*$, so gilt nach einer konstanten Anzahl von Iterationen $l_\epsilon \in \mathbb{N}$ nach den Sätzen 2.4 und 4.19 für den relativen Fehler

$$\frac{\|\tilde{\mathbf{f}}^* - \tilde{\mathbf{f}}_{l_\epsilon}\|_2}{\|\tilde{\mathbf{f}}^*\|_2} < \epsilon,$$

falls für den Polynomgrad $N \in \mathbb{N}$, $N \geq 2$, und den Separationsabstand $q_\mathcal{X}$ der Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ mit Kardinalität M die Beziehung $(N+1)q_\mathcal{X} \geq 16$ erfüllt ist. Damit liegt die Anzahl benötigter arithmetischer Operationen zur Bestimmung eines hinreichend genauen, minimalen 2-Norm Interpolanten in $\mathcal{O}(N^3 \log^2(N) + M)$.

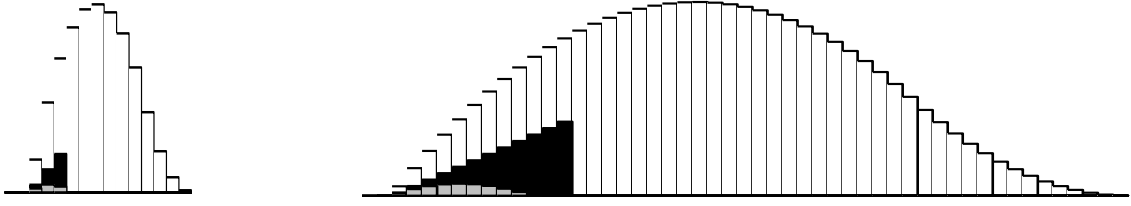


Abbildung 4.2: Hier sehen wir eine bildliche Darstellung des im Beweis von Satz 4.19 benutzten Vergleichsarguments am Beispiel der verwendeten Gewichte $\frac{3}{40}\tilde{\mathbf{w}}_N$ (grau), $\hat{\mathbf{w}}_N$ (schwarz) und $58\bar{\mathbf{w}}_{4N}$ (weiß) für den Polynomgrad $N = 3$ (links) und $N = 12$ (rechts).

4.2.2 Minimale Sobolev-Norm Interpolation

Die erarbeiteten Methoden zur Untersuchung der Stabilität bei der polynomialen Interpolation lassen sich auch für Stabilitätsaussagen bei der Interpolation in den Sobolev-Räumen $\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ (2.23) mit $\frac{3}{2} < s \in \mathbb{R}$ bzw. in positiv definiten Kerne zugeordneten Räumen (engl.: native spaces) [9] anwenden. Wir betrachten diesmal das konvexe Optimierungsproblem

$$\inf_{f \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} \|f\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}, \quad \text{sodass } f(\mathbf{G}_i) = y_i \quad \text{für } i = 0, \dots, M-1 \quad (4.59)$$

mit einer q -separierten Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_i, \dots, \mathbf{G}_M\}$ und den Abtastwerten $\mathbf{y} = (y_0, \dots, y_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$, $M \in \mathbb{N}$. Dieses ist äquivalent zu dem streng konvexen Optimierungsproblem

$$\hat{f}: \inf_{f \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} \sum_{l \in \mathbb{N}_0} \sum_{k, k' = -l}^l (l+1)^{2s-1} \left| \hat{f}_l^{k, k'} \right|^2, \quad \text{sodass } \sum_{l \in \mathbb{N}_0} \sum_{k, k' = -l}^l \hat{f}_l^{k, k'} D_l^{k, k'}(\mathbf{G}_i) = y_i \quad (4.60)$$

für $i = 0, \dots, M-1$. Dabei können wir Lemma 4.1 jedoch aufgrund der nichtendlichen $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung nicht anwenden. Es hilft uns hier aber die Theorie der Hilbert-Räume mit reproduzierenden Kern weiter (siehe [37, Kapitel 10,13]). Dazu definieren wir zunächst die Funktion

$$\Phi_s : [0, \pi] \rightarrow \mathbb{R}, \quad \Phi_s(\omega) := \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l} \left(\cos \left(\frac{\omega}{2} \right) \right). \quad (4.61)$$

Wegen der Abschätzung (2.7) der Chebyshev-Polynome U_{2l} , $l \in \mathbb{N}_0$, bildet die Reihe

$$\Phi_s(0) = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l}(1) = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} (2l+1) \leq 2\zeta(2s-2) \quad (4.62)$$

für jedes $\omega \in [0, \pi]$ eine konvergente Majorante von $\Phi_s(\omega)$. Damit ist aufgrund des Satzes von Weierstraß die Funktion Φ_s beschränkt und stetig. Mit der Funktion Φ_s definieren wir den Sobolev-Kern

$$\begin{aligned} M_s &: \mathcal{SO}(3) \times \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{R}, \\ M_s(\mathbf{G}, \mathbf{H}) &:= \Phi_s(d(\mathbf{G}, \mathbf{H})) = \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l} \left(\cos \left(\frac{d(\mathbf{G}, \mathbf{H})}{2} \right) \right), \end{aligned} \quad (4.63)$$

und betrachten das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{M}_s \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{y} \quad (4.64)$$

mit der Systemmatrix $\mathbf{M}_s := (M_s(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j))_{i,j=0, \dots, M-1}$.

Satz 4.21. Sei $q \in (0, \pi]$ und $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ eine q -separierte Abtastmenge der Kardinalität $M \in \mathbb{N}$ dann gilt für den kleinsten Eigenwert $\lambda_1(\tilde{\mathbf{M}}_s)$ der normierten Systemmatrix $\tilde{\mathbf{M}}_s := \Phi_s(0)^{-1} \mathbf{M}_s$ für $\frac{3}{2} < s \in \mathbb{R}$ die untere Schranke

$$\lambda_1(\tilde{\mathbf{M}}_s) \geq \frac{1}{\zeta(2s-2)} \left(\frac{1}{27} \right)^{2s-2} q^{2s-3}. \quad (4.65)$$

Beweis. Aufgrund der absoluten Konvergenz von (4.63) können wir die Beziehung (4.8) auch auf den Kern M_s verallgemeinern. Wir benutzen für $N = \left\lfloor \frac{27}{q} \right\rfloor - 1$ wieder die Gewichte $\tilde{\mathbf{w}}_N := (\tilde{w}_0, \dots, \tilde{w}_N)^T \in \mathbb{R}_+^{N+1}$ mit

$$\tilde{w}_l := \frac{1}{\|S_3\|_{1,N+1}} \left(S_3 \left(\frac{l}{N+1} \right) - S_3 \left(\frac{l+1}{N+1} \right) \right) \quad \text{für } l = 0, \dots, N$$

des perfekten B-Splines S_3 . Dann folgt für $\mathbf{c} = (c_0, \dots, c_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$ die Abschätzung

$$\begin{aligned} \mathbf{c}^H \mathbf{M}_s \mathbf{c} &= \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} \tilde{w}_l^{-1} \tilde{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\ &\geq \min_{r=0, \dots, N} (r+1)^{1-2s} \frac{(N+1)^3}{24(\sqrt{2}-1)(r+1)} \sum_{l=0}^N \tilde{w}_l \sum_{k,k'=-l}^l \left| \sum_{i=0}^{M-1} c_i D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\ &\geq \frac{1}{10} (1+N)^{3-2s} \lambda_1(\mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) \mathbf{c}^H \mathbf{c}. \end{aligned} \quad (4.66)$$

Nach Satz 4.17 gilt für den kleinsten Eigenwert der Systemmatrix $\mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}$ mit der Wahl von N und $q \leq \pi$ die Beziehung

$$\lambda_1(\mathbf{D}\tilde{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H) \geq 1 - \frac{16^4}{((N+1)q)^4} = 1 - \frac{16^4}{\left(\left\lfloor \frac{27}{q} \right\rfloor q \right)^4} \geq 1 - \frac{16^4}{(27-\pi)^4} \geq \frac{20}{27}.$$

Zusammen mit den Abschätzungen (4.62), (4.66) und Lemma 4.2 erhalten wir die untere Schranke

$$\lambda_1(\tilde{\mathbf{M}}_s) = \frac{1}{\Phi_s(0)} \min_{\mathbf{c} \in \mathbb{C}^M \setminus \{0\}} \frac{\mathbf{c}^H \mathbf{M}_s \mathbf{c}}{\mathbf{c}^H \mathbf{c}} \geq \frac{1}{2\zeta(2s-2)} \frac{2}{27} \left[\frac{27}{q} \right]^{3-2s} \geq \frac{1}{\zeta(2s-2)} \left(\frac{1}{27} \right)^{2s-2} q^{2s-3}$$

des kleinsten Eigenwertes der Systemmatrix $\tilde{\mathbf{M}}_s$. \square

Wegen der in Satz 4.21 gezeigten positiven Definitheit der Systemmatrix \mathbf{M}_s besitzt das Gleichungssystem (4.64) die eindeutige Lösung $\tilde{\mathbf{f}} = (\tilde{f}_0, \dots, \tilde{f}_{M-1}) \in \mathbb{C}^M$ und damit ist die Funktion $f^* : \mathcal{SO}(3) \rightarrow \mathbb{C}$ mit

$$f^*(\mathbf{G}) := \sum_{i=0}^{M-1} \tilde{f}_i M_s(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}) \quad (4.67)$$

ein stetiger Interpolant zum Vektor \mathbf{y} , d.h. $f^*(\mathbf{G}_i) = y_i$ für $i = 0, \dots, M-1$.

Satz 4.22. Für $\frac{3}{2} < s \in \mathbb{R}$ ist der Interpolant f^* (4.67) die eindeutig bestimmte stetige Optimallösung des Interpolationsproblems (4.59).

Beweis. Wir zeigen zunächst das der Sobolev-Kern M_s ein reproduzierender Kern des Sobolev-Raums $\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ ist, d.h., für jedes $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$ ist $M_s(\mathbf{G}, \cdot) \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ und es gilt zusätzlich für jedes $f \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ die reproduzierende Eigenschaft

$$f(\mathbf{G}) = \langle f, M_s(\mathbf{G}, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}. \quad (4.68)$$

Sei also $\mathbf{G} \in \mathcal{SO}(3)$, dann gilt mit der Darstellung

$$\begin{aligned} M_s(\mathbf{G}, \cdot) &= \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l} \left(\cos \left(\frac{d(\mathbf{G}, \mathbf{H})}{2} \right) \right) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k, k'=-l}^l (l+1)^{1-2s} \overline{D_l^{k, k'}(\mathbf{G})} D_l^{k, k'}(\cdot) \end{aligned}$$

und der Definition des Skalarprodukts die Beziehung

$$\begin{aligned} \langle M_s(\mathbf{G}, \cdot), M_s(\mathbf{G}, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k, k'=-l}^l (l+1)^{2s-1} \overline{M_s(\mathbf{G}, \cdot)_l^{k, k'}} M_s(\mathbf{G}, \cdot)_l^{k, k'} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k, k'=-l}^l (l+1)^{1-2s} \overline{D_l^{k, k'}(\mathbf{G})} D_l^{k, k'}(\mathbf{G}) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l}(1) = \Phi_s(0) < \infty \end{aligned}$$

und damit $M_s(\mathbf{G}, \cdot) \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$. Folglich gilt für den stetigen Interpolant $f^* \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$. Sei nun zusätzlich $f \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ beliebig, dann ergibt sich die reproduzierende Eigenschaft

$$\begin{aligned} \langle f, M_s(\mathbf{G}, \cdot) \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k, k'=-l}^l (l+1)^{2s-1} \hat{f}_l^{k, k'} \overline{M_s(\mathbf{G}, \cdot)_l^{k, k'}} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{k, k'=-l}^l \hat{f}_l^{k, k'} D_l^{k, k'}(\mathbf{G}) = f(\mathbf{G}). \end{aligned}$$

Für den Beweis der Minimaleigenschaft sei nun $g \in \mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))$ ein weiterer Interpolant. Es folgt dann mit den Eigenschaften der induzierten Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}$ der Zusammenhang

$$\begin{aligned} \|g\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}^2 &= \|g - f^* + f^*\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}^2 \\ &= \|f^*\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}^2 + \|g - f^*\|_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}^2 + 2 \langle f^*, g - f^* \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))}. \end{aligned}$$

Mit der reproduzierenden Eigenschaft (4.68) des Sobolev-Kerns M_s erhalten wir schließlich mit

$$\begin{aligned} \langle f^*, g - f^* \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} &= \left\langle \sum_{i=0}^{M-1} \tilde{f}_i M_s(\mathbf{G}_i, \cdot), g - f^* \right\rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} \\ &= \sum_{i=0}^{M-1} \tilde{f}_i \langle M_s(\mathbf{G}_i, \cdot), g - f^* \rangle_{\mathcal{H}_s^2(\mathcal{SO}(3))} \\ &= \sum_{i=0}^{M-1} \tilde{f}_i (g(\mathbf{G}_i) - f^*(\mathbf{G}_i)) = 0 \end{aligned}$$

die Aussage des Satzes. \square

Bemerkung 4.23. Zur Berechnung einer Näherungslösung des Interpolationsproblems (4.59) mit der Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ approximieren wir die Systemmatrix $\mathbf{M}_s \in \mathbb{C}^{M \times M}$, $\frac{3}{2} < s$, für ein festes $\epsilon \in \mathbb{R}_+$ durch die Matrix $\bar{\mathbf{M}}_s = (\bar{M}_s(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j))_{i,j=0,\dots,M} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ mit

$$\bar{M}_s(\mathbf{G}, \mathbf{H}) = \sum_{l=0}^N (l+1)^{1-2s} U_{2l} \left(\cos \left(\frac{d(\mathbf{G}, \mathbf{H})}{2} \right) \right),$$

sodass für den Abschneidefehler gilt

$$\begin{aligned} |M_s(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j) - \bar{M}_s(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)| &= \sum_{l=N+1}^{\infty} (l+1)^{1-2s} U_{2l} \left(\cos \left(\frac{d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)}{2} \right) \right) \\ &\leq 2 \int_N^{\infty} (1+l)^{2-2s} dl \leq \epsilon \quad \text{für } i, j = 0, \dots, M-1. \end{aligned}$$

Da die Matrix $\bar{\mathbf{M}}$ die Systemmatrix eines polynomialen Interpolationsproblems ist (vgl. Lemma 4.1), können wir mit Hilfe der nichtäquidistanten $\mathcal{SO}(3)$ -FFT [26] die Matrixvektormultiplikation in $\mathcal{O}(N^3 \log^2(N) + M)$ arithmetischen Operationen durchführen. Interessieren wir uns weiterhin nur für gut konditionierte Matrizen $\mathbf{M}_s, \bar{\mathbf{M}}_s$, so wählen wir $N \geq \left\lfloor \frac{27}{q} \right\rfloor - 1$ (vgl. Beweis von Satz 4.21). Damit benötigt wir für q -separierte Abtastmengen \mathcal{X} mit $M \geq \frac{C}{q^3}$ Abtastpunkten $\mathcal{O}(M \log^2(M))$ arithmetische Operationen für eine Matrixvektormultiplikation.

5 Approximation

In diesem Kapitel untersuchen wir einen weiteren Lösungsansatz zu Konstruktion von Polynomen $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ vom Grad $N \in \mathbb{N}_0$ aus abgetasteten Werten $\mathbf{y} := (y_0, \dots, y_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$, $M \in \mathbb{N}$, an Punkten der Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$. Falls $M > d_N$ ist im Allgemeinen bei der Konstruktion nur eine Näherung

$$f(\mathbf{G}_i) \approx y_i \quad \text{für } i = 0, \dots, M$$

zu erreichen. Deswegen untersuchen wir für Gewichte $\mathbf{w} := (w_0, \dots, w_{M-1})^T \in \mathbb{R}_+^M$ das gewichtete kleinste Quadrate Problem

$$\min_{f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))} \sum_{i=0}^{M-1} w_i |y_i - f(\mathbf{G}_i)|^2. \quad (5.1)$$

Eine Lösung $f^* \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ des obigen Problems stellt dann für uns eine recht gute Approximation der gegebenen Daten dar. Die Gewichte \mathbf{w} können dabei als eine Art Quadraturgewichte verstanden werden, wie wir später an Hand sogenannter Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen sehen werden. Mit

$$\|\mathbf{g}\|_{\mathbf{w},2} := \left(\sum_{i=0}^{M-1} w_i |g_i|^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

bezeichnen wir die $\ell_{\mathbf{w}}^2$ -Norm eines Vektors $\mathbf{g} := (g_0, \dots, g_{M-1})^T \in \mathbb{C}^M$. Mit Hilfe der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Entwicklung (2.19) von f ergibt sich mit der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} := (D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i))_{i=0, \dots, M-1; (l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ und dem $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizientenvektor $\hat{\mathbf{f}} := (\hat{f}_l^{k,k'})_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{d_N}$ für die Problemstellung (5.1) die kompakte Schreibweise

$$\min_{\hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \sum_{i=0}^{M-1} w_i \left| y_i - \sum_{(l,k,k') \in J_N} \hat{f}_l^{k,k'} D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 = \min_{\hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}} \left\| \mathbf{y} - \mathbf{D} \hat{\mathbf{f}} \right\|_{\mathbf{w},2}^2. \quad (5.2)$$

Lemma 5.1. *Das gewichtete kleinste Quadrate Problem (5.1) ist äquivalent zu der Normalequation erster Art*

$$\mathbf{A}^H \mathbf{A} \tilde{\mathbf{f}} = \mathbf{A}^H \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{y} \quad (5.3)$$

mit der Matrix $\mathbf{A} := \mathbf{W}^{\frac{1}{2}} \mathbf{D} \hat{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$, dem normierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizientenvektor $\tilde{\mathbf{f}} := \hat{\mathbf{W}}^{-\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{f}} \in \mathbb{C}^{d_N}$, der Gewichtsmatrix $\mathbf{W} := \text{diag}(\mathbf{w}) \in \mathbb{R}_+^{M \times M}$ und der Skalierungsmatrix $\hat{\mathbf{W}} := \text{diag}(\hat{\mathbf{w}}) \in \mathbb{R}_+^{d_N \times d_N}$ des Skalierungsvektors $\hat{\mathbf{w}} := (2l+1)_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{R}_+^{d_N}$.

Beweis. Das Gleichungssystem (5.3) ist wegen [2, Theorem 1.1.2] mit der Matrix \mathbf{A} , dem Vektor $\mathbf{b} = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\mathbf{y}$ und der Beziehung $\mathbf{A}\hat{\mathbf{f}} = \mathbf{W}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}\hat{\mathbf{f}}$ äquivalent zum Optimierungsproblem (5.2). \square

Nach obigen Lemma stellen wir im Gegensatz zu dem Interpolationsproblem (4.3) fest, dass durch eine Skalierung der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten sich auch die Systemmatrix $\mathbf{B} := \mathbf{A}^H \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ und damit ihre Kondition ändert. Eine gute Skalierung ist somit grundlegend für vernünftige Stabilitätsaussagen. Durch die im Lemma 5.1 getroffene Normierung ist es jedoch mit Hilfe der Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen möglich gute Aussagen über die Kondition $\kappa(\mathbf{B})$ der Systemmatrix \mathbf{B} in Abhängigkeit der Maschenweite $\delta_{\mathcal{X}}$ der Abtastmenge \mathcal{X} und des Polynomgrads N zu machen.

5.1 Stabilität und Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen

Unter bestimmten Voraussetzungen ist für $f \in \mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$ die kontinuierliche $\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))$ -Norm $\|f\|_{\mathcal{L}^2(\mathcal{SO}(3))}$ äquivalent zu der diskreten $\ell_{\mathbf{w},2}^2$ -Norm $\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{w},2}$ des Abtastvektor $\mathbf{f} := (f(\mathbf{G}_0), \dots, f(\mathbf{G}_{M-1}))^T \in \mathbb{C}^M$, d.h., die beiden Normen lassen sich gegeneinander abschätzen. Betrachten wir zu der Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ die zugehörige Voronoi-Partition $V_{\mathcal{X}} = \{\Omega_i \subset \mathcal{SO}(3) \mid i = 0, \dots, M-1\}$ mit den Voronoi-Zellen Ω_i , siehe (3.3) und (3.4), so erhalten wir die Voronoi-Gewichte $\mathbf{w} := (w_0, \dots, w_{M-1})^T \in \mathbb{R}_+^M$ mit

$$w_i := \mu(\Omega_i) \quad \text{für } i = 0, \dots, M-1. \quad (5.4)$$

Satz 5.2. Für $\delta \in (0, \pi]$ sei eine δ -dichte Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ mit zugehörigen Voronoi-Gewichten $\mathbf{w} \in \mathbb{R}_+^M$, $M \in \mathbb{N}$, siehe (5.4), gegeben. Für Polynome $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ mit dem Polynomgrad $N < \frac{1}{463\delta}$ und dem Abtastvektor $\mathbf{f} := (f(\mathbf{G}_0), \dots, f(\mathbf{G}_{M-1}))^T \in \mathbb{C}^M$ gilt die Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung

$$(1 - 463N\delta) \|\mathbf{f}\|_2^2 \leq \|\mathbf{f}\|_{\mathbf{w},2}^2 \leq (1 + 463N\delta) \|\mathbf{f}\|_2^2. \quad (5.5)$$

Beweis. Die Behauptung ergibt sich mit [29, Theorem 4.5] für $p = 2$. \square

In [22, 12] wurden erstmals Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichungen auf der Sphäre \mathbb{S}^2 entwickelt, die dann z.B. in [18] Anwendung für Stabilitätsaussagen der gewichteten kleinsten Quadrate Approximation auf der Sphäre \mathbb{S}^2 fanden. Auf analoge Weise werden wir die Kondition $\kappa(\mathbf{B})$ der Systemmatrix \mathbf{B} des Optimierungsproblems (5.1) abschätzen und erhalten die folgende, schon in [29] erarbeitete, Stabilitätsaussage.

Folgerung 5.3. Für $\delta \in (0, \pi]$ sei eine δ -dichte Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$ mit zugehörigen Voronoi-Gewichten (5.4) $\mathbf{w} \in \mathbb{R}_+^M$, $M \in \mathbb{N}$, gegeben. Dann sind die Eigenwerte der Systemmatrix $\mathbf{B} = \mathbf{A}^H \mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times M}$ aus Lemma 5.1 für den Polynomgrad $N < \frac{1}{463\delta}$ durch

$$1 - 463N\delta \leq \lambda_1(\mathbf{B}) \leq \lambda_M(\mathbf{B}) \leq 1 + 463N\delta \quad (5.6)$$

beschränkt.

Beweis. Für die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ aus Lemma 5.1 mit den Voronoi-Gewichten $\mathbf{w} = (w_0, \dots, w_{M-1}) \in \mathbb{R}_+^M$ gilt mit dem normierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Vektor $\tilde{\mathbf{f}} := (\tilde{f}_l^{k,k'})_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{d_N}$ und dem Abtastvektor $\mathbf{f} := (f(\mathbf{G}_0), \dots, f(\mathbf{G}_{M-1})) \in \mathbb{C}^M$ eines beliebigen Polynoms $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ die Beziehung

$$\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{w},2} = \left\| D\hat{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}} \tilde{\mathbf{f}} \right\|_{\mathbf{w},2} = \|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{f}}\|_2$$

sowie aufgrund der Parsevalschen Gleichung (2.20) der Zusammenhang

$$\|f\|_2 = \|\tilde{\mathbf{f}}\|_2.$$

Damit erhalten wir zunächst die Identität

$$\frac{\tilde{\mathbf{f}}^H \mathbf{B} \tilde{\mathbf{f}}}{\tilde{\mathbf{f}}^H \tilde{\mathbf{f}}} = \frac{\|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{f}}\|_2^2}{\|\tilde{\mathbf{f}}\|_2^2} = \frac{\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{w},2}^2}{\|f\|_2^2}$$

und mit Satz 5.2 die Abschätzung

$$1 - 463N\delta \leq \frac{\tilde{\mathbf{f}}^H \mathbf{B} \tilde{\mathbf{f}}}{\tilde{\mathbf{f}}^H \tilde{\mathbf{f}}} \leq 1 + 463N\delta,$$

womit sich nach Lemma 4.2 die Behauptung ergibt. \square

In dem Beweis der Folgerung 5.3 wurde der Zusammenhang zwischen der Konditionszahl $\kappa(\mathbf{B})$ und der Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung des Satzes 5.2 auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ hergestellt. Nach dem Satz 5.2 sehen wir, dass mit $\varepsilon \in (0, 1)$ die Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung

$$1 - \varepsilon \leq \frac{\|\mathbf{f}\|_{\mathbf{w},2}}{\|f\|_2} \leq 1 + \varepsilon \quad \text{für } f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3)) \quad (5.7)$$

zu einer gegebenen δ -dichten Abtastmenge \mathcal{X} nur für einen sehr kleinen Polynomgrad $N < \frac{\varepsilon}{463\delta}$ garantiert werden kann. Deswegen untersuchen wir im Folgendem die Frage mit welcher Wahrscheinlichkeit wir die Gültigkeit einer solchen Ungleichung sichern können, falls ein größerer Polynomgrad N gewählt wird. In [6] wurde dies erstmals untersucht.

Dazu bezeichnen wir mit $U(\mathbb{B}^{d_N})$ die Gleichverteilung der normalisierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten $\tilde{\mathbf{f}} \in \mathbb{B}^{d_N}$ und mit $\mathbb{P}(E)$ die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses E unter der Gleichverteilung $U(\mathbb{B}^{d_N})$. Ziehen wir nun zufällig einen $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten $\tilde{\mathbf{f}}$ aus dieser Gleichverteilung $U(\mathbb{B}^{d_N})$, so ergibt sich eine Wahrscheinlichkeit, mit welcher dieser $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizienten $\tilde{\mathbf{f}}$ die Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung des Satzes 5.2 erfüllt. Dabei wird sich zeigen, dass diese Wahrscheinlichkeit unabhängig vom Polynomgrad N sehr hoch ist, wenn für eine hinreichend dichte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ für ein $L \in (1, \infty)$ die Gleichmäßigkeitsbedingung $\frac{\delta_{\mathcal{X}}}{q_{\mathcal{X}}} < L$ erfüllt ist. Dazu werden wir die Frobenius-Norm $\|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}$ der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ aus Lemma 5.1 mit Hilfe der Methoden aus Kapitel 4 abschätzen. Den Beweis führen wir dann analog zu dem der sphärischen probabilistischen Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung [6, Theorem 4.2], welcher auf Wahrscheinlichkeitsaussagen aus [5] aufbaut.

Lemma 5.4. Sei für $q \in (0, \pi]$ eine q -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} = \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$, $M \in \mathbb{N}$, gegeben. Für die Frobenius-Norm $\|\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H\|_{\mathbb{F}}^2$ mit der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} := (D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i))_{i=0,\dots,M-1; (l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$, $N \in \mathbb{N}_0$, und der Skalierungsmatrix $\hat{\mathbf{W}} = \text{diag}(\hat{\mathbf{w}}) \in \mathbb{R}_+^{d_N \times d_N}$ des Skalierungsvektors $\hat{\mathbf{w}} := (2l+1)_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{R}_+^{d_N}$ gilt die Abschätzung

$$\left\| \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H \right\|_{\mathbb{F}}^2 \leq Md_N^2 + 120\pi^3 M(N+1)^2(N+2)^2 q^{-3}. \quad (5.8)$$

Beweis. Wir benutzen wieder die Beziehung

$$\mathbf{K} = \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H = (K_N(d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j)))_{i,j=0,\dots,M-1}$$

aus Lemma 4.1 mit dem trigonometrischen Polynom

$$K_N(t) = \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt}$$

und den Gewichten $w_k := ((N+1)^2 - k^2)$ für $k = -N, \dots, N$. Die Differenz erster Ordnung Δw der Folge $w := (w_k)_{k \in \mathbb{N}}$ mit $w_k = 0$ für $|k| > N$ kennen wir schon aus dem Beweis des Satzes 4.19 zur Stabilitätsaussage (4.56) der minimalen 2-Norm Interpolation. Damit ergibt sich nach dem Satz 4.3 für $t \in [-\pi, \pi] \setminus \{0\}$ das folgende Abklingverhalten

$$K_N(t) = \sum_{k=-N}^N w_k e^{ikt} \leq \frac{\pi \|\Delta w\|_1}{2|t|} = \frac{\pi(N+1)(N+2)}{|t|}$$

des trigonometrischen Polynoms K_N . Für die Abschätzung der Frobenius-Norm $\|\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H\|_{\mathbb{F}}^2$ benutzen wir wieder die Schranken (3.8) für die Anzahl der Elemente des m -ten Ringes $|R_{\mathcal{X},q,m}|$ einer q -separierten Abtastmenge \mathcal{X} aus Lemma 3.1 und erhalten die Ungleichungskette

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H \right\|_{\mathbb{F}}^2 &= \sum_{i,j=0}^M \left| (\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H)_{i,j} \right|^2 = \sum_{i=0}^M \left(|K_N(0)|^2 + \sum_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^M |K_N(d(\mathbf{G}_i, \mathbf{G}_j))|^2 \right) \\ &\leq Md_N^2 + \sum_{i=0}^M \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} |R_{\mathcal{X},q,m}| \max_{\mathbf{G} \in R_{\mathcal{X},q,m}} |K_N(d(\mathbf{I}, \mathbf{G}))|^2 \\ &\leq Md_N^2 + M \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} (48m^2 + 48m + 24) \frac{\pi^2(N+1)^2(N+2)^2}{(mq)^2} \\ &\leq Md_N^2 + M \sum_{m=1}^{\lfloor \pi q^{-1} \rfloor} 120 \frac{\pi^2(N+1)^2(N+2)^2}{q^2} \\ &\leq Md_N^2 + 120\pi^3 M(N+1)^2(N+2)^2 q^{-3} \end{aligned}$$

und damit die Behauptung. □

Folgerung 5.5. Sei für $q, \delta \in (0, \pi]$ eine q -separierte und δ -dichte Abtastmenge $\mathcal{X} := \{\mathbf{G}_0, \dots, \mathbf{G}_{M-1}\} \subset \mathcal{SO}(3)$, $M \in \mathbb{N}$, gegeben. Für die Frobenius-Norm $\|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}^2$ der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$, $N \in \mathbb{N}_0$, aus Lemma (5.1) gilt die Abschätzung

$$\|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}^2 \leq \frac{M\delta^6}{48^2\pi^2} (d_N^2 + 120\pi^3(N+1)^2(N+2)^2q^{-3}).$$

Beweis. Zunächst folgt für die Matrix \mathbf{A} mit der Beziehung zu der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$, der Skalierungsmatrix $\hat{\mathbf{W}} \in \mathbb{R}_+^{d_N \times d_N}$ aus Lemma 5.1 und der Gewichtsmatrix $\mathbf{W} := \text{diag}(\mathbf{w}) \in \mathbb{R}_+^{M \times M}$ der Voronoi-Gewichte $\mathbf{w} := (w_0, \dots, w_{M-1}) \in \mathbb{R}_+^M$, siehe (5.4), der Zusammenhang

$$\|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}^2 = \sum_{i,j=0}^M |(\mathbf{A}\mathbf{A}^H)_{i,j}|^2 = \sum_{i,j=0}^M w_i w_j \left| (\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H)_{i,j} \right|^2.$$

Dadurch erhalten wir mit der Eigenschaft der Voronoi-Zellen $\Omega_i \subset B_{\frac{\delta}{2}}(\mathbf{G}_i)$ für $i = 0, \dots, M-1$ und der Abschätzung (3.9) aus Lemma 3.1 die Ungleichung

$$\|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}^2 \leq \left(\mu \left(B_{\frac{\delta}{2}}(\mathbf{I}) \right) \right)^2 \sum_{i,j=0}^M \left| (\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H)_{i,j} \right|^2 = \frac{\delta^6}{48^2\pi^2} \left\| \mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}\mathbf{D}^H \right\|_{\mathbb{F}}^2$$

und mit Hilfe des Lemma 5.4 die Behauptung. \square

Obwohl ein Zusammenhang des folgenden Satzes für Stabilitätsaussagen im bisherigen Sinne nicht gegeben ist, werden wir nun das Kapitel mit diesem sehr überraschenden Resultat schließen.

Satz 5.6. Seien $\varepsilon \in (0, 1)$, $\eta \in (0, 1)$, $L \in (1, \infty)$ und für $q, \delta \in (0, \pi]$ eine q -separierte und δ -dichte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ gegeben. Dann existiert eine Zahl $\varrho_0 = \varrho_0(\varepsilon, \eta, L) \in \mathbb{R}_+$, sodass

$$\mathbb{P} \left((1 - \varepsilon) \|f\|_2 \leq \|f\|_{\mathbf{w},2} \leq (1 + \varepsilon) \|f\|_2 \right) \geq 1 - \eta \quad (5.9)$$

für jeden Polynomgrad $N \in \mathbb{N}_0$ gilt, falls die Gleichmäßigkeitsbedingung $\frac{\delta}{q} \leq L$ und die Überdeckungseigenschaft $\delta \leq \varrho_0$ erfüllt ist.

Beweis. Wir benutzen die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ aus Lemma 5.1 mit den Voronoi-Gewichten $\mathbf{w} := (w_0, \dots, w_{M-1}) \in \mathbb{R}_+^M$. Dann gelten mit dem normierten $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Vektor $\tilde{\mathbf{f}} := (\tilde{f}_l^{k,k'})_{(l,k,k') \in J_N} \in \mathbb{C}^{d_N}$ und dem Abtastvektor $\mathbf{f} := (f(\mathbf{G}_0), \dots, f(\mathbf{G}_{M-1})) \in \mathbb{C}^M$ eines Polynoms $f \in \Pi_N(\mathcal{SO}(3))$ wie im Beweis der Folgerung 5.3 die Beziehungen

$$\|f\|_{\mathbf{w},2} = \left\| \mathbf{A}\tilde{\mathbf{f}} \right\|_2 \quad \text{und} \quad \|f\|_2 = \left\| \tilde{\mathbf{f}} \right\|_2.$$

Mit dem Additionstheorems (2.21) für Wigner D -Funktionen und der Eigenschaft $\sum_{i=0}^{M-1} w_i = 1$ der Voronoi-Gewichte w_i erhalten wir die Gleichung

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\|_{\mathbb{F}}^2 &= \text{Spur}(\mathbf{A}^H\mathbf{A}) = \text{Spur}(\hat{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^H\mathbf{W}\mathbf{D}\hat{\mathbf{W}}^{\frac{1}{2}}) = \sum_{(l,k,k') \in J_N} \sum_{i=0}^M w_i (2l+1) \left| D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 \\ &= \sum_{i=0}^M w_i \sum_{l=0}^N \sum_{k,k'=-l}^l (2l+1) \left| D_l^{k,k'}(\mathbf{G}_i) \right|^2 = \sum_{i=0}^M w_i \sum_{l=0}^N (2l+1) U_{2l}(0) \\ &= \sum_{i=0}^M w_i \sum_{l=0}^N (2l+1)^2 = \sum_{i=0}^M w_i d_N = d_N. \end{aligned}$$

Damit bekommen wir für ein zufällig aus der Gleichverteilung $U(\mathbb{B}^{d_N})$ gezogenen $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Koeffizientenvektor $\tilde{\mathbf{f}}$ nach [6, Corollary 2.2] und Lemma 5.5 die Abschätzung für die Wahrscheinlichkeit

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(1 - \varepsilon \leq \frac{\|\mathbf{A}\tilde{\mathbf{f}}\|_2}{\|\tilde{\mathbf{f}}\|_2} \leq 1 + \varepsilon \right) &\geq 1 - \frac{2 \|\mathbf{A}\mathbf{A}^H\|_{\mathbb{F}}^2}{d_N^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2} \\ &\geq 1 - \frac{2M\delta^6}{48^2 \pi^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2} - \frac{240\pi^3 M(N+1)^2(N+2)^2 \delta^6}{48^2 \pi^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2 d_N^2 q^3} \\ &\geq 1 - \frac{2M\delta^6}{48^2 \pi^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2} - \frac{960\pi M\delta^6}{48^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2 (2N+1)^2 q^3}. \end{aligned}$$

Der erste Term der rechten Seite lässt sich mittels der Ungleichung (3.6) nach Lemma 3.1 für $\delta \leq \varrho_1 := \varrho_1(\varepsilon, \eta, L)$ durch

$$\frac{2M\delta^6}{48^2 \pi^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2} \leq \frac{2Mq^3}{48^2 \pi^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2} \frac{\delta^3}{q^3} \delta^3 < (66\varepsilon^2(2 - \varepsilon)^2)^{-1} L^3 \delta^3 \leq \frac{\eta}{2}$$

beschränken. Falls $N\delta \leq \frac{\varepsilon}{463}$ gilt, ist die Behauptung (5.9) wegen des Satzes 5.2 trivialerweise erfüllt. Sei nun $N\delta > \frac{\varepsilon}{463}$, dann ergibt sich wieder mit der Ungleichung (3.6) die folgende Abschätzung des zweiten Terms

$$\frac{960\pi M\delta^6}{48^2 \varepsilon^2 (2 - \varepsilon)^2 (2N+1)^2 q^3} \leq 57 \frac{\delta^6}{q^6} (\varepsilon^2(2 - \varepsilon)^2)^{-1} N^{-2} < 13 \cdot 10^6 L^6 \delta^2 (\varepsilon^4(2 - \varepsilon)^2)^{-1}.$$

Dieser lässt sich somit auch mit einem $\varrho_2 := \varrho_2(\varepsilon, \eta, L) \geq \delta$ durch $\frac{\eta}{2}$ beschränken. Damit ist die Behauptung (5.9) für $\delta \leq \varrho_0 := \min(\varrho_1, \varrho_2)$ gezeigt. \square

6 Auswertung/Ausblick

6.1 Resultate

In der vorliegenden Arbeit konnten wir die Methoden aus [18] für Stabilitätsaussagen bei der polynomialen Approximation auf der Sphäre \mathbb{S}^2 erfolgreich auf den Fall der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ übertragen. Dabei wurde in [29] mit der Untersuchung der gewichteten kleinsten Quadrate Approximation bereits gezeigt, dass für eine $\delta_{\mathcal{X}}$ -dichte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ unter der Bedingung

$$N < \frac{1}{463\delta_{\mathcal{X}}}$$

die $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$ vollen Spaltenrang besitzt. Kompletieren konnten wir dieses Resultat mit der Behandlung des Interpolationsproblems und erhalten für eine $q_{\mathcal{X}}$ -separierte Abtastmenge $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ unter der Bedingung

$$N \geq \frac{16}{q_{\mathcal{X}}}$$

vollen Zeilenrang der $\mathcal{SO}(3)$ -Fourier-Matrix $\mathbf{D} \in \mathbb{C}^{M \times d_N}$. Die verwendeten Methoden zum Erhalt dieser Abschätzungen konnten wir dabei im Vergleich zu [14] weiter ausbauen. Es ist uns sogar gelungen mit einer erweiterten Vergleichsmethode die Kondition der Systemmatrix im Fall der minimalen 2-Norm Interpolation unter der Bedingung $Nq_{\mathcal{X}} \geq 16$ gleichmäßig abzuschätzen. Schließlich haben wir noch Konstruktionen relativ gleichmäßig verteilter Abtastmengen \mathcal{X} angegeben, die für etwaige Problemstellungen der Rekonstruktion komplexwertiger Funktionen der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ angewendet werden können.

6.2 Offene Probleme

Bei der Suche nach optimal lokalisierten trigonometrischen Funktionen sind wir auf die perfekten Splines gestoßen, welche einer gewissen Optimalitätsbedingung genügen. Eine interessante Frage ist dann, ob diese perfekten Splines auch noch Lösung des Optimierungsproblems (4.33) sind, wenn die max-Norm durch die totale Variation ersetzt wird.

Für die numerische Analysis auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ stellt sich auch die Frage nach guten Abtastmengen $\mathcal{X} \subset \mathcal{SO}(3)$ in Hinblick auf Quadraturverfahren, die Polynome für eine gegebene Anzahl von Abtastpunkten bis zu einem möglichst großen Polynomgrad exakt integrieren. Solche Quadraturregeln können dann mit Hilfe der $\mathcal{SO}(3)$ -FFTs schnell ausgewertet werden.

Schließlich bleiben noch Fragen zur Anwendbarkeit der probabilistischen Marcinkiewicz-Zygmund Ungleichung aus Satz 5.6 für die algorithmische Umsetzung zur Rekonstruktion von Funktionen auf der Rotationsgruppe $\mathcal{SO}(3)$ bzw. für Stabilitätsaussagen bisheriger Algorithmen.

Literaturverzeichnis

- [1] ABRAMOWITZ, M. (Hrsg.) ; STEGUN, I. A. (Hrsg.): *Handbook of Mathematical Functions*. Washington, DC, USA : National Bureau of Standards, 1972
- [2] BJÖRCK, Å. : *Numerical Methods for Least Squares Problems*. Philadelphia, PA, USA : SIAM, 1996
- [3] BOJANOV, B. D. ; HAKOPIAN, H. A. ; SAHAKIAN, A. A.: *Spline functions and multivariate interpolations*. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers Group, 1993. – x+276 S.
- [4] BOOGAART, K. G. ; HIELSCHER, R. ; PRESTIN, J. ; SCHAEBEN, H. : Kernel-based methods for inversion of the Radon transform on $SO(3)$ and their applications to texture analysis. In: *J. Comput. Appl. Math.* 199 (2007), S. 122 – 140
- [5] BÖTTCHER, A. ; GRUDSKY, S. : The norm of the product of a large matrix and a random vector. In: *Electronic Journal of Probability* 8 (2003), S. 1 – 29
- [6] BÖTTCHER, A. ; KUNIS, S. ; POTTS, D. : Probabilistic spherical Marcinkiewicz-Zygmund inequalities. In: *Preprint 2007-21, Univ. Chemnitz* (2007)
- [7] CASTRILLON-CANDAS, J. E. ; SIDDAVANAHALLI, V. ; BAJAJ, C. : Nonequispaced Fourier Transforms for Protein-Protein Docking. In: *ICES Report 05-44, Univ. Texas* (2005)
- [8] CONWAY, J. H. ; SLOANE, N. J. A.: *Sphere packings, lattices and groups*. Second. New York, NY, USA : Springer-Verlag, 1993. – xlv+679 S.
- [9] ERB, W. ; FILBIR, F. : Approximation by positive definite functions on compact groups. In: *Preprint 07-23, Helmholtz Zentrum München* (2007)
- [10] FICHTENHOLZ, G. M.: *Differential- und Integralrechnung. III*. Berlin : VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, 1987
- [11] FILBIR, F. ; SCHMID, D. : Stability results for approximation by positive definite functions on $SO(3)$. In: *J. Approx. Theory* (accepted)
- [12] FILBIR, F. ; THEMISTOCLAKIS, W. : Polynomial approximation on the sphere using scattered data. In: *Math. Nachr.* 281 (2008), S. 650 – 668
- [13] FREEDEN, W. ; GERVENIS, T. ; SCHREINER, M. : *Constructive Approximation on the Sphere*. Oxford : Oxford University Press, 1998
- [14] GRÄF, M. ; KUNIS, S. : Stability results for scattered data interpolation on the rotation group. In: *Electron. Trans. Numer. Anal.* (accepted)
- [15] HANKE-BOURGEOIS, M. : *Grundlagen der numerischen Mathematik und des wissenschaftlichen Rechnens*. Stuttgart : B. G. Teubner, 2002. – 838 S.
- [16] HIELSCHER, R. : *The Radon Transform on the Rotation Group – Inversion and Application to Texture Analysis*. Dissertation, Department of Geology, Technical University Bergakademie Freiberg. <http://ibb.gsf.de/homepage/ralf.hielscher>. Version: 2007

- [17] HORN, R. A. ; JOHNSON, C. R.: *Matrix Analysis*. Cambridge : Cambridge University Press, 1985
- [18] KEINER, J. ; KUNIS, S. ; POTTS, D. : Efficient reconstruction of functions on the sphere from scattered data. In: *J. Fourier Anal. Appl.* 13 (2007), S. 435 – 458
- [19] KÖNIGSBERGER, K. : *Analysis. 1.* 6. Berlin : Springer-Verlag, 2004
- [20] KOSTELEC, P. J. ; ROCKMORE, D. N.: FFTs on the Rotation Group. In: *J. Fourier Anal. Appl.* 14 (2008), S. 145 – 179
- [21] KUNIS, S. ; POTTS, D. : Stability results for scattered data interpolation by trigonometric polynomials. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 29 (2007), S. 1403 – 1419
- [22] MHASKAR, H. N. ; NARCOWICH, F. J. ; WARD, J. D.: Spherical Marcinkiewicz-Zygmund Inequalities and Positive Quadrature. In: *Math. Comput.* 70 (2001), S. 1113 – 1130. – Corrigendum on the positivity of the quadrature weights in 71:453 – 454, 2002
- [23] MHASKAR, H. N. ; PRESTIN, J. : On the detection of singularities of a periodic function. In: *Adv. Comput. Math.* 12 (2000), S. 95 – 131
- [24] MITCHELL, J. C.: Sampling rotation groups by successive orthogonal images. In: *SIAM J. Sci. Comput.* 30 (2008), S. 525 – 547
- [25] MÜLLER, C. : *Spherical Harmonics*. Aachen : Springer, 1966
- [26] POTTS, D. ; PRESTIN, J. ; VOLLRATH, A. : A fast Fourier algorithm on the rotation group. In: *Preprint A-07-06, Universität zu Lübeck* (2007)
- [27] RENKA, R. J.: Algorithm 772: STRIPACK: Delaunay triangulation and Voronoi diagram on the surface of a sphere. In: *ACM Trans. Math. Softw.* 23 (1997), S. 416 – 434. – ISSN 0098–3500. – For accompanying software, see <http://www.acm.org/pubs/calgo>
- [28] SAFF, E. B. ; KUIJLAARS, A. B. J.: Distributing many points on a sphere. In: *Math. Intelligencer* 19 (1997), S. 5 – 11
- [29] SCHMID, D. : Marcinkiewicz-Zygmund inequalities and polynomial approximation from scattered data on $SO(3)$. In: *Numer. Funct. Anal. Optim.* (accepted)
- [30] SCHOENBERG, I. J.: The perfect B -splines and a time-optimal control problem. In: *Israel J. Math.* 10 (1971), S. 261 – 274
- [31] SCHOENBERG, I. J.: *Cardinal spline interpolation*. Philadelphia, PA, USA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1973. – vi+125 S.
- [32] STERNBERG, S. : *Group theory and physics*. Cambridge : Cambridge University Press, 1994. – xiv+429 S.
- [33] STEWART, G. W.: The efficient generation of random orthogonal matrices with an application to condition estimators. In: *SIAM J. Numer. Anal.* 17 (1980), S. 403 – 409
- [34] STOER, J. : *Numerische Mathematik. 1.* 8. Berlin : Springer-Verlag, 2002. – xii+367 S.
- [35] VARSHALOVICH, D. ; MOSKALEV, A. ; KHERSONSKI, V. : *Quantum Theory of Angular Momentum*. Singapore : World Scientific Publishing, 1988. – pp. 21–23 S.

-
- [36] VILENKIN, N. : *Special Functions and the Theory of Group Representations*. Providence, RI : Amer. Math. Soc., 1968
- [37] WENDLAND, H. : *Scattered Data Approximation*. Cambridge : Cambridge University Press, 2005 (Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics)
- [38] YERSHOVA, A. ; LAVALLE, S. M.: Deterministic sampling methods for spheres and $SO(3)$. In: *Proceedings. IEEE International Conference on Robotics and Automation*. Bd. 4, ICRA 2004, S. 3974 – 3980

Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig angefertigt, nicht anderweitig zu Prüfungszwecken vorgelegt und keine anderen als die angegebenen Hilfsmittel verwendet habe. Sämtliche wissentlich verwendete Textausschnitte, Zitate oder Inhalte anderer Verfasser wurden ausdrücklich als solche gekennzeichnet.

Chemnitz, den 15. Juli 2008

Manuel Gräf