

Georg Kratochwill, BSc

# **Analyse und Vergleich verschiedener Varianten der schnellen Gauß–Transformation**

## **MASTERARBEIT**

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Ingenieur

Masterstudium Technomathematik

eingereicht an der

**Technischen Universität Graz**

Betreuer

Assoc. Prof. Dr. G. Of

Institut für Angewandte Mathematik

Graz, August 2018



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Aufgabenstellung</b>	<b>7</b>
2.1	Grundzüge des Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation . . . . .	7
2.2	Veranschaulichung der Approximation durch Reihenentwicklungen . . . . .	8
2.3	Approximation durch Vernachlässigung weit entfernter Punkte . . . . .	11
2.4	Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation . . . . .	13
<b>3</b>	<b>Schnelle Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklung</b>	<b>15</b>
3.1	Reihenentwicklungen und Fehlerabschätzungen . . . . .	15
3.1.1	Reihenentwicklung in $\mathbb{R}$ . . . . .	15
3.1.2	Reihenentwicklung im $\mathbb{R}^d$ . . . . .	18
3.1.3	Anwendung der Reihenentwicklungen und Fehlerabschätzungen . . . . .	21
3.1.4	Zusammenfassung . . . . .	33
3.2	Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation . . . . .	34
3.2.1	Wahl der Parameter . . . . .	34
3.2.2	Rechenaufwandsanalyse . . . . .	35
3.2.3	Algorithmus . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Schnelle Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung</b>	<b>41</b>
4.1	Reihenentwicklung und Fehlerabschätzungen . . . . .	41
4.1.1	Chebyshev-Entwicklungen in $\mathbb{R}$ und Abschätzungen der Entwicklungskoeffizienten . . . . .	44
4.1.2	Chebyshev-Entwicklung im $\mathbb{R}^d$ und Abschätzungen des Gesamtfehlers . . . . .	51
4.2	Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung . . . . .	59
4.2.1	Berechnung der Koeffizienten der Chebyshev-Entwicklung . . . . .	59
4.2.2	Effiziente Berechnung von $C_\beta$ . . . . .	63
4.2.3	Rechenaufwandsanalyse . . . . .	64
4.2.4	Vergleich des Rechenaufwands mit Hermite- und Taylor-Entwicklung . . . . .	66
4.2.5	Algorithmus . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Numerische Tests und Vergleiche</b>	<b>69</b>
5.1	Numerische Tests zur Hermite- und Taylor-Entwicklung . . . . .	69
5.1.1	Überprüfung der Fehlerabschätzungen . . . . .	69
5.1.2	Fehler bei nicht symmetrischer Punktverteilung . . . . .	70
5.1.3	Vergleich für verschiedene Verfeinerungsstufen . . . . .	71

5.2	Numerische Tests zur Chebyshev–Entwicklung . . . . .	71
5.2.1	Abschätzung der Chebyshev–Entwicklungskoeffizienten . . . . .	72
5.2.2	Überprüfung des Fehlers der Chebyshev–Entwicklung . . . . .	73
5.2.3	Vernachlässigung weit entfernter Punkte . . . . .	77
5.3	Vergleich beider Varianten . . . . .	79
5.3.1	Vergleich des absoluten Fehlers bei fixen Parametern . . . . .	79
5.3.2	Vergleich der Rechenzeiten bei fixen Parametern . . . . .	80
5.3.3	Rechenzeitvergleich mit direkter Auswertung . . . . .	82
5.3.4	Vergleich der Rechenzeiten bei optimierten Parametern . . . . .	83
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>91</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>93</b>

# 1 Einleitung

Die mathematische Beschreibung von physikalischen Prozessen führt in der Regel auf Differentialgleichungen. So auch die Beschreibung von Wärmeleitung. Die instationäre Wärmeleitung wird durch die partielle Differentialgleichung

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}u(x, t) &= \Delta u(x, t) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^2, t > 0 \\ u(x, 0) &= f(x) \quad \text{für } x \in \mathbb{R}^2\end{aligned}$$

beschrieben. Da diese Gleichung im Allgemeinen nicht analytisch gelöst werden kann, müssen Methoden der numerischen Mathematik angewandt werden. Die Lösung des obigen Anfangswertproblems lässt sich z.B. durch [20]

$$u(x, t + \Delta t) = \frac{1}{\pi\delta} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-|x-y|^2/\delta} u(y, t) dy, \quad \delta = 4\Delta t$$

angeben. Eine numerische Integrationsmethode führt auf folgende näherungsweise Darstellung der Lösung

$$u(x_i, t + \Delta t) \approx \sum_{j=1}^N q_j e^{-|x_i - y_j|^2/\delta}, \quad 1 \leq i \leq M,$$

mit  $y_j, x_i \in \mathbb{R}^d$ ,  $q_j \in \mathbb{R}$  und  $\delta = 4\Delta t > 0$ . Die  $y_j$  sind dabei die Integrationsknoten für die numerische Integration, und die  $x_i$  die Auswertungspunkte für den nächsten Zeitschritt.

Allgemein wird die Transformation einer Funktion  $f: \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$

$$G_\delta f(x) = \int_{\Omega} e^{-|x-y|^2/\delta} f(y) dy,$$

für ein Gebiet  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  und mit  $\delta > 0$ , als Gauß-Transformation bezeichnet. Durch Anwendung einer Quadraturregel mit  $N$  Integrationsknoten  $s_j$  und Auswertung der Transformation in  $M$  Punkten  $t_i$ , gelangt man, wie im obigen Beispiel beschrieben, zur diskreten Gauß-Transformation

$$G(t_i) = \sum_{j=1}^N q_j e^{-|t_i - s_j|^2/\delta}, \quad 1 \leq i \leq M. \tag{1.1}$$

Neben der Anwendung zur Lösung der Wärmeleitgleichung, tritt diese Art der Transformation auch noch in Anwendungen wie zum Beispiel der Potentialtheorie [3], in der Statistik bei der Berechnung von Maximum Likelihood Schätzern [6], in der Strömungsmechanik [4]

oder der Tomographie [10] auf. Es ist daher naheliegend, eine möglichst schnelle Berechnung dieser Transformation zu gewährleisten. Für die Auswertung des Ausdrucks (1.1) mit  $N$  Integrationspunkten und  $M$  Auswertungspunkten, ergibt sich ein Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(MN)$ . Es ist allerdings möglich eine Approximation der Lösung zu erhalten, deren Berechnung einen Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(N + M)$  hat, also linear mit der Anzahl an Punkten steigt.

Die in dieser Arbeit beschriebene Methode beruht auf einer geeigneten Zusammenfassung der Punkte, um lokale Reihenentwicklungen der Exponentialfunktion zu ermöglichen, und der Vernachlässigung von gewissen Teilsummen. Durch geeignetes Abbrechen der Reihenentwicklungen erhält man eine Approximation der diskreten Gauß-Transformation. Der daraus resultierende Algorithmus wird schnelle Gauß-Transformation genannt. Diese Methode wurde bereits 1990 in einer Arbeit von L. Greengard und J. Strain [7] beschrieben. Dabei wurden Hermite- und Taylor-Entwicklungen zur Approximation der Exponentialfunktion verwendet. Diese Methode liefert eine Approximation der Lösung mit  $\mathcal{O}(N + M)$  Aufwand. Eine alternative Methode, die eine Chebyshev-Entwicklung benützt, wurde 2009 von J. Tausch und A. Weckiewicz [19] beschrieben. Anwendungen der schnellen Gauß-Transformation finden sich in Arbeiten von J. Tausch [18], M. Messner [12] und M. Schanz [13].

Die Gauß-Transformation ist ein Spezialfall einer Faltung. Somit lassen sich auch numerische Methoden zur Berechnung einer Faltung anwenden. Ein Beispiel dazu ist die schnelle Fourier-Transformation. Bei dieser ist aber eine gleichmäßige Verteilung der Punkte notwendig. Als Rechenaufwand für  $N$  Integrationspunkte und  $N$  Auswertungspunkten ergibt sich hier allerdings  $\mathcal{O}(N \log(N))$ . Auf diese Methode wird hier aber nicht näher eingegangen, sie sei hier nur erwähnt.

Ziel dieser Arbeit ist der Vergleich verschiedener Varianten der schnellen Gauß-Transformation. Im wesentlichen werden einerseits die schnelle Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklung nach der Arbeit von L. Greengard und J. Strain [7], und andererseits die schnelle Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung nach J. Tausch und A. Weckiewicz [19] analysiert und miteinander verglichen. Die Arbeit ist wie folgt gegliedert. In Kapitel 2 werden noch einmal die genauen Details zur Aufgabenstellung, also der Berechnung der diskreten Gauß-Transformation, zusammengefasst. Außerdem werden die Grundzüge des Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation beschrieben, und grafisch veranschaulicht. Die Kapitel 3 und 4 befassen sich dann mit den theoretischen Grundlagen der Reihenentwicklungen. In Kapitel 3 wird die Hermite- und Taylor-Entwicklung eingeführt und analysiert, in Kapitel 4 die Chebyshev-Entwicklung. Es werden sowohl Fehlerabschätzungen angegeben, als auch Rechenaufwandsanalysen der beiden Methoden durchgeführt. In Kapitel 5 finden sich dann die Ergebnisse der numerischen Tests, um diese beiden Methoden zu vergleichen. Im abschließenden Kapitel 6 werden die Ergebnisse zusammengefasst.

Es sei hier auch noch erwähnt, dass bereits im Projekt [9] einige Auszüge aus dieser Arbeit für eine kompakte Darstellung verwendet wurden. Dabei wurden dort aber insbesondere Details und Beweise weggelassen.

## 2 Aufgabenstellung

Die Anwendung einer Quadraturregel zur Berechnung der *Gauß-Transformation*

$$G_\delta f(x) = \int_{\Omega} e^{-|x-y|^2/\delta} f(y) dy \quad (\delta > 0)$$

führt auf die *diskrete Gauß-Transformation* [7]

$$G(x) = \sum_{j=1}^N q_j e^{-|x-s_j|^2/\delta}.$$

Diese Funktion soll nun in  $M$  Zielpunkten  $t_i$  ausgewertet werden. Allgemein gilt  $s_j, t_i \in \mathbb{R}^d$ , aber man kann durch Modifikation des Skalierungsfaktors  $\delta$  voraussetzen, dass  $s_j, t_i \in [0, 1]^d$  gilt. Das führt auf folgende Aufgabenstellung: Gesucht sind die  $M$  Funktionswerte  $G(t_i)$  der Funktion

$$G(t_i) = \sum_{j=1}^N q_j e^{-|t_i-s_j|^2/\delta}, \quad 1 \leq i \leq M, \quad (2.1)$$

mit  $s_j, t_i \in [0, 1]^d$ ,  $q_j \in \mathbb{R}$  und  $\delta > 0$ . Der Rechenaufwand für die Berechnung der  $M$  Funktionswerte beträgt  $\mathcal{O}(NM)$ . Ziel ist es, die Summe durch einen geeigneten Algorithmus in  $\mathcal{O}(N+M)$  zu approximieren, wobei die Konstante nur von der Raumdimension  $d$  und der gewünschten Genauigkeit  $\varepsilon$  abhängt. Dieser Algorithmus wird in den folgenden Abschnitten beschrieben.

### 2.1 Grundzüge des Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation

Die gegebenen Quellpunkte  $s_j$  und Zielpunkte  $t_i$  liegen in einer Box  $B_0 = [0, 1]^d \subset \mathbb{R}^d$ . Der Algorithmus zur Approximation der diskreten Gauß-Transformation beruht auf einem geeigneten Zusammenfassen von Teilsummen, Weglassen vernachlässigbarer Teilsummen und der Verwendung von Reihenentwicklungen zur Separation der Variablen für eine effiziente Berechnung. Zunächst wird die Box  $B_0$  in kleinere Boxen unterteilt. Die Auswertung von (2.1) in einem Punkt  $t_i$  kann dann als Summe über all diese Boxen geschrieben werden. Zur Approximation betrachtet man nun den Einfluss den die Punkte einer Quellbox  $B$  auf die Auswertungspunkte in einer Zielbox  $C$  haben. Dabei gibt es zwei wesentliche Möglichkeiten den Rechenaufwand zu reduzieren:

- **Reihenentwicklung der Exponentialfunktion**

Der Beitrag, der aus einer Quellbox kommt, kann durch eine Reihenentwicklung innerhalb der Box approximiert werden, sodass bei der Auswertung in einer Zielbox nur mehr auf die Entwicklungskoeffizienten zurückgegriffen werden muss. Diese Reihenentwicklung ist für alle Auswertungspunkte in der Zielbox verwendbar. Damit kann die Interaktion zwischen den beiden Boxen mit linearem Aufwand berechnet werden. Außerdem kann statt der direkten Auswertung in einer Box eine Reihenentwicklung in der Zielbox berechnet werden, womit bei der Auswertung in den Zielpunkten nur mehr die Reihenentwicklung ausgewertet werden muss. Diese beiden Reihenentwicklungen können auch kombiniert werden, was dann zu 3 Rechenschritten führt: Aufstellung der Entwicklungskoeffizienten für jede Quellbox, Berechnung der Entwicklungskoeffizienten der Zielboxen durch Interaktion zwischen den Quell- und Zielboxen und Auswertung der Reihenentwicklungen für alle Zielboxen. In Abschnitt 2.2 werden diese Schritte anhand eines einfachen Beispiels noch einmal veranschaulicht. Die genaue Herleitung und Analyse von 2 verschiedenen möglichen Reihenentwicklungen wird in den folgenden Kapiteln 3 und 4 beschrieben.

- **Vernachlässigung weit entfernter Boxen**

Da der Einfluss eines Quellpunktes auf einen Zielpunkt mit dem Abstand exponentiell abfällt, können bei der Auswertung in einer Zielbox weit entfernte Quellboxen weggelassen werden. Dieser Approximationsschritt wird in Abschnitt 2.3 genauer beschrieben.

## 2.2 Veranschaulichung der Approximation durch Reihenentwicklungen

In diesem Abschnitt soll die bereits erwähnte Approximation der diskreten Gauß-Transformation durch geeignete Reihenentwicklungen anhand eines einfachen Beispiels veranschaulicht werden. Gegeben seien  $N$  Quellpunkte und  $M$  Zielpunkte im  $\mathbb{R}^2$ . Die Menge der Quell- und Zielpunkte wird jeweils in  $k$  Boxen unterteilt und im folgenden wird beschrieben, wie der Beitrag einer Quellbox  $B$  zu einer Zielbox  $C$  effizient berechnet werden kann.

### Direkte Auswertung

Bei der direkten Auswertung der diskreten Gauß-Transformation (2.1) muss der Beitrag jedes Quellpunktes zu jedem Zielpunkt berücksichtigt werden. Es ergibt sich somit ein Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(NM)$ . In Abbildung 2.1 wird dies veranschaulicht.

### Reihenentwicklung in der Quellbox

Eine Möglichkeit den Rechenaufwand zu reduzieren besteht darin, den Beitrag der Quellen innerhalb der Box in einer Reihenentwicklung zusammenzufassen. Für die Auswertung in den einzelnen Punkten der Zielbox muss dann nur noch die lokale Reihenentwicklung ausgewertet werden. Da für den Gesamtaufwand aber der Beitrag aller Quellboxen berücksichtigt

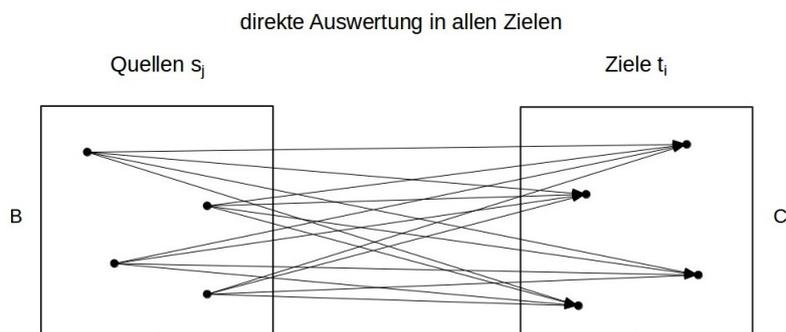


Abbildung 2.1: Direkte Auswertung der diskreten Gauß-Transformation.

werden muss, hängt der Rechenaufwand nun auch zusätzlich von der Anzahl der Boxen  $k$  ab. Auf zusätzliche Faktoren für die Aufstellung und Auswertung der Reihenentwicklung, wie Entwicklungsgrad oder Raumdimension, wird an dieser Stelle nicht eingegangen. Der Rechenaufwand beträgt somit  $\mathcal{O}(N + kM)$ . Die entsprechenden Operationen werden in Abbildung 2.2 dargestellt.

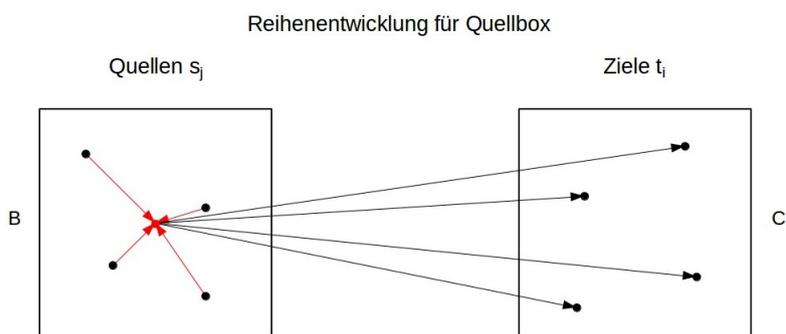


Abbildung 2.2: Approximation der diskreten Gauß-Transformation durch Zusammenfassen der Quellbeiträge in eine Reihenentwicklung.

### Reihenentwicklung in der Zielbox

Es ist natürlich auch möglich statt in der Quellbox in der Zielbox eine Reihenentwicklung durchzuführen. Dabei wird bei der Berechnung der Entwicklungskoeffizienten der Beitrag aller Quellpunkte berücksichtigt, und dann die Entwicklung in allen Zielpunkten ausgewertet. Auch hier ergibt sich ein Aufwand von  $\mathcal{O}(kN + M)$ , und die entsprechenden Operationen werden in Abbildung 2.3 veranschaulicht.

### Reihenentwicklung in Quell- und Zielbox

Die beiden zuvor erwähnten Reihenentwicklungen lassen sich auch kombinieren. Dafür



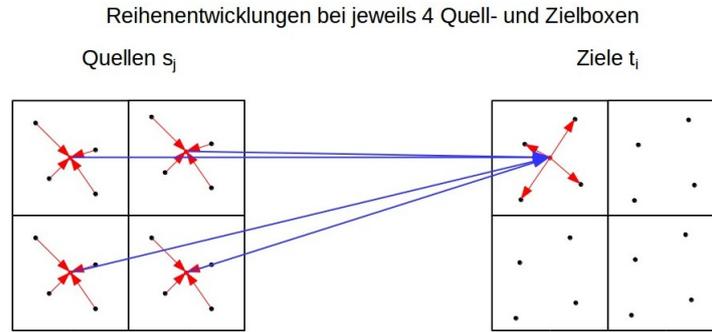


Abbildung 2.5: Approximation der diskreten Gauß-Transformation durch lokale Reihenentwicklungen bei mehreren Boxen.

## 2.3 Approximation durch Vernachlässigung weit entfernter Punkte

Neben den im vorigen Abschnitt beschriebenen Reihenentwicklungen kann für die Approximation der diskreten Gauß-Transformation auch deren exponentielles Abklingen ausgenutzt werden. Für die Berechnung der diskreten Gauß-Transformation

$$G(t_i) = \sum_{j=1}^N q_j e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta}, \quad 1 \leq i \leq M, \quad (2.2)$$

mit  $s_j, t_i \in B_0 = [0, 1]^d$ , wird die Box  $B_0$  in kleinere Boxen  $B_k$  mit Kantenlänge  $s$  und halber Kantenlänge  $h = s/2$  unterteilt. Betrachtet man obige Summe für einen fixen Auswertungspunkt  $t_i \in B_k$ , dann ist die Summe über alle Quellpunkte  $s_j$  zu bilden. Aufgrund des exponentiellen Abklingens der Exponentialfunktion ist der Anteil durch Quellen  $s_j$  aus weit entfernten Boxen sehr gering, und die Anteile der entsprechenden Boxen können daher bei der Summation vernachlässigt werden. Man erhält somit eine Approximation  $\tilde{G}$  der diskreten Gauß-Transformation durch

$$\tilde{G}(t_i) = \sum_{j=1}^{\tilde{N}} q_j e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta},$$

wobei in der Summe nur die  $\tilde{N}$  Quellen berücksichtigt werden, die in den  $(2n+1)^d$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$  nächsten Boxen zur aktuellen Box  $B_k$  liegen. Der Parameter  $n$  entspricht dabei der Anzahl an Boxen, die, von der aktuellen Box aus gesehen, in eine Richtung berücksichtigt werden.

### Beispiel

Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 2.6 ein einfaches Beispiel für  $d = 2$  zu sehen. Hier wird  $B_0$  in  $8 \times 8 = 64$  Boxen unterteilt. Für  $n = 1$  werden bei der Auswertung von  $\tilde{G}$  in

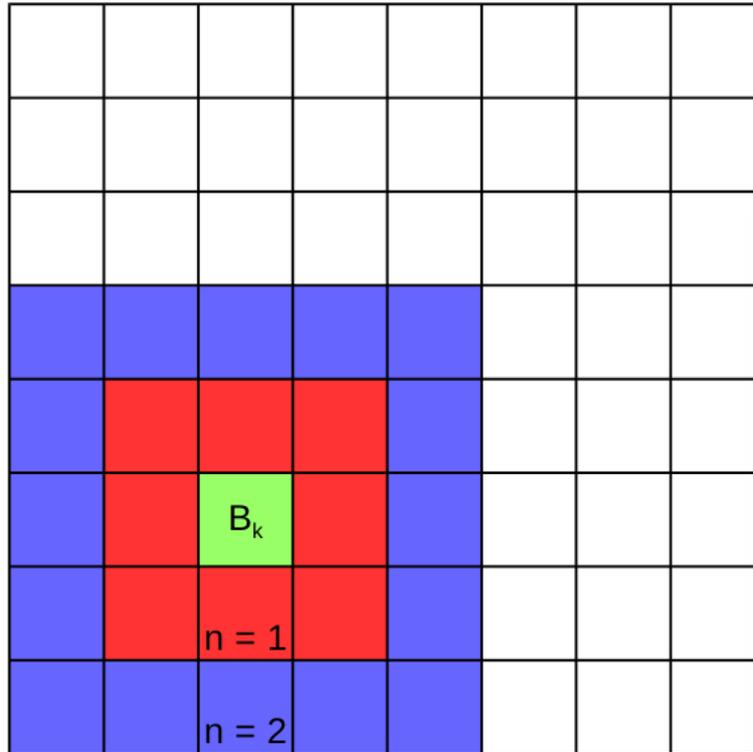


Abbildung 2.6: Veranschaulichung der berücksichtigten Boxen für  $n = 1, 2$  bei der Auswertung der diskreten Gauß-Transformation in einer Box  $B_k$ .

einem Zielpunkt  $t_i \in B_i$  neben dieser Box auch der Ring aus roten Boxen, also insgesamt  $(2 \cdot 1 + 1)^2 = 9$  Boxen berücksichtigt. Für  $n = 2$  wird zusätzlich auch der Ring der blauen Boxen, also insgesamt  $(2 \cdot 2 + 1)^2 = 25$  Boxen berücksichtigt. Der Parameter  $n$  entspricht somit der Anzahl an Ringen von Boxen, die bei der Auswertung in einer Box berücksichtigt werden.

Der folgende Satz liefert eine Abschätzung für den absoluten Fehler, der durch diese Approximationsmethode entsteht.

**Satz 2.1** ([7, Kapitel 3]). *Werden zur Berechnung der diskreten Gauß-Transformation (2.2) in einem Punkt  $t_i \in B_i$  nur die  $(2n + 1)^d$  umliegenden Boxen berücksichtigt, so lässt sich der Fehler der so erhaltenen Approximation  $\tilde{G}$  abschätzen durch*

$$|(G - \tilde{G})(t_i)| \leq Q e^{-4h^2 n^2 / \delta}, \quad (2.3)$$

mit  $Q = \sum_{j=1}^N |q_j|$  und halber Kantenlänge  $h = s/2$  der Boxen.

*Beweis.* In jede Richtung werden nur die  $n$  nächsten Boxen berücksichtigt. Mit der halben Kantenlänge  $h = s/2$  der Boxen gilt daher für einen Punkt  $s_j$ , der nicht berücksichtigt

wird,

$$|t_i - s_j| \geq 2h \cdot n \Leftrightarrow \frac{|t_i - s_j|^2}{\delta} \geq \frac{4h^2 n^2}{\delta} \Leftrightarrow e^{-\frac{|t_i - s_j|^2}{\delta}} \leq e^{-4h^2 n^2 / \delta}$$

für alle  $t_i$  der aktuellen Box  $B_k$ . Diese Abschätzung ist unabhängig von der Raumdimension  $d$ . Sei  $\tilde{N}$  die Anzahl der berücksichtigten Punkte. Dann entspricht der Gesamtfehler der Summe über alle Punkte in den nicht berücksichtigten Boxen, und lässt sich somit abschätzen durch

$$|(G - \tilde{G})(t_i)| = \left| \sum_{j=\tilde{N}+1}^N q_j e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta} \right| \leq \sum_{j=\tilde{N}+1}^N |q_j| \left| e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta} \right| \leq Q e^{-4h^2 n^2 / \delta},$$

mit  $Q = \sum_{j=1}^N |q_j|$ . □

Zu einer gegebenen Fehlertoleranz  $\varepsilon > 0$  lässt sich gemäß (2.3) der Parameter  $n$  so wählen, dass

$$|(G - \tilde{G})(t_i)| < \varepsilon$$

gilt. Ein numerisches Beispiel dazu wird in Abschnitt 5.2.3 gemacht. Auch bei den abschließenden numerischen Tests in Abschnitt 5.3.4 wird noch einmal genauer auf die konkrete Anwendung von Formel (2.3) eingegangen.

## 2.4 Algorithmus der schnellen Gauß–Transformation

Die in den Abschnitten 2.2 und 2.3 beschriebenen Methoden zur Approximation der diskreten Gauß–Transformation lassen sich in Form eines Algorithmus zusammenfassen. Folgende Parameter müssen für den Algorithmus gewählt werden:

- Die Anzahl an Verfeinerungsschritten für die Unterteilung der Ausgangsbox  $B_0$ , woraus sich die Anzahl  $N_{Box}$  an Boxen ergibt.
- $n$  beschreibt die Anzahl der Boxen, die bei der Auswertung einer Reihenentwicklung berücksichtigt werden (siehe Abschnitt 2.3).
- $N_F$  und  $M_L$  sind Schranken für die Punktzahl innerhalb einer Box, ab der zwischen einer direkten Auswertung und einer Reihenentwicklung gewechselt wird.

Aus der Anzahl an Verfeinerungsschritten für die Unterteilung der Punktmenge in kleinere Boxen ergibt sich die Anzahl an Boxen  $N_{Box}$ . Die sich daraus ergebende Größe der Boxen hat einen Einfluss auf den Approximationsfehler und muss dementsprechend gewählt werden. Wie dieser Einfluss konkret aussieht, wird in den Kapiteln 3 und 4 zu den einzelnen Reihenentwicklungen im Detail beschrieben. Für die in Abschnitt 2.3 beschriebene Vernachlässigung weit entfernter Boxen muss außerdem der Parameter  $n$  entsprechend gewählt werden. Auch hier ergibt sich ein Einfluss auf den Approximationsfehler, der aber unabhängig vom zuvor beschriebenen Fehler ist. Daher kann  $n$  zusätzlich zur Anzahl an

Verfeinerungsschritten gewählt werden. Eine wesentliche Erweiterung zu dem von J. Tausch und A. Weckiewicz [19] beschriebenen Algorithmus ist die bereits von L. Greengard und J. Strain in [7] betrachtete Kombination der verschiedenen Reihenentwicklungen. Dazu werden zusätzliche Parameter  $N_F$  und  $M_L$  eingeführt. Mit Hilfe dieser Parameter wird für jede Box, abhängig von der Punktzahl in der Box, entschieden, ob eine lokale Reihenentwicklung gemacht werden soll oder nicht. Details zur Wahl dieser Parameter finden sich in Kapitel 5 mit den numerischen Tests.

Der Algorithmus gliedert sich in 2 Schleifen. In einer ersten Schleife werden die Beiträge aller Quellboxen auf die Zielboxen verteilt. Dabei wird mit Hilfe der oben erwähnten Parameter  $N_F$  und  $M_L$  entschieden, ob die Beiträge in Quell- und Zielbox direkt oder über eine Reihenentwicklung berücksichtigt werden. Außerdem werden, wie in Abschnitt 2.3 beschrieben, nur jene Zielboxen berücksichtigt, die nahe genug an der aktuellen Quellbox liegen. In der zweiten Schleife wird dann in allen Zielboxen, in denen statt einer direkten Auswertung eine Reihenentwicklung gemacht wurde, diese in allen Zielpunkten ausgewertet.

---

**Algorithmus 1** Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation
 

---

```

for  $k = 1, N_{Box}$  do                                ▷ Schleife über alle Quellboxen
  if  $N_{B_k} < N_F$  then
    for  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  do                        ▷ Schleife über Nahfeldboxen
      if  $M_{C_\ell} < M_L$  then
        direkte Auswertung der DGT (Abbildung 2.1)
      else
        Berechnung der Zielbox-Entwicklung (Abbildung 2.3)
      end if
    end for
  else
    Berechnung der Quellbox-Entwicklung (Abbildungen 2.2 und 2.4)
    for  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  do                        ▷ Schleife über Nahfeldboxen
      if  $M_{C_\ell} < M_L$  then
        direkte Auswertung der Quell-Entwicklung (Abbildung 2.2)
      else
        Berechnung der Zielbox-Entwicklung (Abbildung 2.4)
      end if
    end for
  end if
end for
for  $\ell = 1, N_{Box}$  do                                ▷ Schleife über alle Zielboxen
  if  $M_{C_\ell} \geq M_L$  then
    Auswertung der Zielbox-Entwicklung (Abbildungen 2.3 und 2.4)
  end if
end for

```

---

# 3 Schnelle Gauß–Transformation mit Hermite– und Taylor–Entwicklung

Wie bereits im vorigen Kapitel beschrieben, kann die diskrete Gauß–Transformation (2.1) durch geeignete Reihenentwicklungen approximiert werden. Eine erste Variante nach L. Greengard und J. Strain [7] nutzt dazu Hermite– und Taylor–Entwicklungen. Im folgenden Abschnitt 3.1 werden die theoretischen Grundlagen und die Anwendung dieser Reihenentwicklungen auf die diskrete Gauß–Transformation diskutiert. Der daraus resultierende Algorithmus wird dann im darauf folgenden Abschnitt 3.2 angegeben und analysiert. Für das Projekt [9] wurden einige Auszüge aus diesem Kapitel verwendet, wobei dort aber insbesondere Details und Beweise für eine kompaktere Darstellung weggelassen wurden.

## 3.1 Reihenentwicklungen und Fehlerabschätzungen

In diesem Abschnitt werden die theoretischen Grundlagen der Hermite– und Taylor–Entwicklung eingeführt. Außerdem wird die Anwendung dieser Reihenentwicklungen auf die diskrete Gauß–Transformation beschrieben. Für die Quellpunkte wird eine Hermite–Entwicklung gemacht, und für die Zielpunkte wird eine Taylor–Entwicklung verwendet. Die Eigenschaften dieser Reihenentwicklungen, insbesondere die Fehlerabschätzungen, die durch einen Abbruch der Entwicklung entstehen, werden in diesem Abschnitt beschrieben. Die Notation richtet sich dabei nach den Arbeiten von J. Strain und L. Greengard [7, 16]. Die in diesen Arbeiten hergeleiteten Fehlerabschätzungen sind fehlerhaft, was in der späteren Veröffentlichung [16] bestätigt wurde. Eine korrigierte Fehlerabschätzung wurde in einer jüngeren Arbeit von J. Strain [17] ohne Herleitung angegeben. Hier werden nun entsprechende Fehlerabschätzungen bewiesen.

### 3.1.1 Reihenentwicklung in $\mathbb{R}$

Zunächst werden die Hermite–Funktionen in einer Dimension ( $d = 1$ ) definiert und wichtige Eigenschaften angegeben. Die Erweiterung auf den  $\mathbb{R}^d$  folgt im nächsten Abschnitt. Die Beweise zu einigen Aussagen, die hier nicht ausgeführt wurden, finden sich zum Beispiel in [8] oder [21].

**Definition 3.1** ([5, Kapitel 10.13, Formel 7]). *Die Hermite–Polynome sind definiert durch*

$$H_n(t) = (-1)^n e^{t^2} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}, \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0.$$

Der folgende Satz liefert eine für die Herleitung der Hermite-Reihenentwicklung wichtige Eigenschaft der Hermite-Polynome, die sich durch die Betrachtung der Taylor-Entwicklung der erzeugenden Funktion beweisen lässt.

**Satz 3.2** ([21, Lemma 15.5]). *Die erzeugende Funktion der Hermite-Polynome ist*

$$e^{2ts-s^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(t). \quad (3.1)$$

*Beweis.* Die Aussage lässt sich durch Betrachtung einer Taylorreihe beweisen. Die eindimensionale Taylorreihe einer Funktion  $f(t)$  mit Entwicklungspunkt  $t$  und Auswertungspunkt  $t+s$  lautet

$$f(t+s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} f(t).$$

Betrachtet man nun die Taylorreihe der Funktion  $f(t) = e^{-t^2}$ , so erhält man

$$f(t+s) = e^{-(t+s)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}.$$

Aus der Definition der Hermite-Polynome (Def. 3.1) folgt die Darstellung

$$(-1)^n e^{-t^2} H_n(t) = \frac{d^n}{dt^n} e^{-t^2}.$$

Setzt man diese Identität in obige Taylorreihe ein, erhält man

$$f(t+s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} (-1)^n e^{-t^2} H_n(t).$$

Ersetzt man  $s$  durch  $-s$ , so fällt in der Reihenentwicklung der Faktor  $(-1)^n$  weg, und man erhält

$$f(t-s) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} e^{-t^2} H_n(t).$$

Multipliziert man diese Gleichung nun mit  $e^{t^2}$ , erhält man wegen

$$f(t-s)e^{t^2} = e^{-(t-s)^2} e^{t^2} = e^{-t^2+2ts-s^2} e^{t^2} = e^{2ts-s^2}$$

die gewünschte Identität

$$e^{2ts-s^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(t).$$

□

**Definition 3.3.** Die Hermite-Funktionen sind definiert durch

$$h_n(t) = e^{-t^2} H_n(t), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.2)$$

**Satz 3.4** (eindimensionale Hermite-Entwicklung). Für  $s, t \in \mathbb{R}$  lautet die eindimensionale Hermite-Entwicklung einer Gauß-Funktion

$$e^{-(t-s)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} h_n(t). \quad (3.3)$$

*Beweis.* Multiplikation der Gleichung (3.1) mit  $e^{-t^2}$  führt auf

$$e^{2ts-s^2} e^{-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} H_n(t) e^{-t^2}.$$

Durch Anwendung der binomischen Formel auf der linken Seite und mit der Definition der Hermite-Funktionen auf der rechten Seite erhält man die gewünschte Reihenentwicklung

$$e^{-(t-s)^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} h_n(t).$$

□

Diese Formel (3.3) lässt sich nun mit  $\delta > 0$  und  $s_0 \in \mathbb{R}$  umformen auf

$$\begin{aligned} e^{-(t-s)^2/\delta} &= e^{-(t-s_0-(s-s_0))^2/\delta} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{s-s_0}{\sqrt{\delta}} \right)^n h_n \left( \frac{t-s_0}{\sqrt{\delta}} \right). \end{aligned} \quad (3.4)$$

Die erhaltene Formel lässt sich als Auswertung der Gauß-Funktion im Punkt  $t \in \mathbb{R}$ , bei einer Hermite-Entwicklung um  $s_0$  deuten.

Durch Vertauschung von  $s$  und  $t$  erhält man mit dem Entwicklungspunkt  $t_0 \in \mathbb{R}$  analog

$$e^{-(t-s)^2/\delta} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} h_n \left( \frac{s-t_0}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t-t_0}{\sqrt{\delta}} \right)^n,$$

was einer Taylor-Entwicklung um  $t_0$  entspricht.

Zur späteren Abschätzung der Reihenentwicklungen wird die folgende Ungleichung für Hermite-Polynome benötigt.

**Satz 3.5** (Cramer'sche Ungleichung [8]). Für die Hermite-Polynome (3.1) gilt

$$|H_n(t)| \leq K 2^{n/2} \sqrt{n!} e^{t^2/2},$$

mit  $t \in \mathbb{R}$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$  und  $K < 1.09$ .

Multipliziert man die Cramer'sche Ungleichung mit  $e^{-t^2}$  erhält man die entsprechende Ungleichung für die Hermite–Funktionen:

**Lemma 3.6.** *Für die Hermite–Funktionen (3.2) gilt*

$$|h_n(t)| \leq K 2^{n/2} \sqrt{n!} e^{-t^2/2},$$

mit  $t \in \mathbb{R}$ ,  $n \in \mathbb{N}_0$  und  $K < 1.09$ .

Eine weitere wichtige Eigenschaft der Hermite–Polynome und Hermite–Funktionen sind folgende Rekursionsformeln.

**Satz 3.7** ([5, Kapitel 10.13, Formel 10]). *Die Hermite–Polynome erfüllen die Rekursion*

$$H_{n+1}(t) = 2t H_n(t) - 2n H_{n-1}(t), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N},$$

mit

$$H_0(t) = 1, \quad H_1(t) = 2t.$$

Die Rekursionsformel der Hermite–Polynome überträgt sich gemäß (3.2) auch auf die Hermite–Funktionen.

**Lemma 3.8.** *Für die Hermite–Funktionen (3.2) gilt*

$$h_{n+1}(t) = 2t h_n(t) - 2n h_{n-1}(t), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N},$$

mit

$$h_0(t) = e^{-t^2}, \quad h_1(t) = 2te^{-t^2}.$$

**Bemerkung 3.1.** *Aus den Rekursionsformeln ist leicht ersichtlich, dass die Hermite–Polynome und Hermite–Funktionen folgende Symmetrien erfüllen*

$$H_n(-t) = (-1)^n H_n(t), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0,$$

$$h_n(-t) = (-1)^n h_n(t), \quad t \in \mathbb{R}, n \in \mathbb{N}_0.$$

### 3.1.2 Reihenentwicklung im $\mathbb{R}^d$

Um die Notation von Indizes im mehrdimensionalen Fall zu vereinfachen, wird vor der Definition der mehrdimensionalen Hermite–Funktionen noch die Multiindex–Notation eingeführt.

**Definition 3.9.** *Der Vektor  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d)$ ,  $\alpha_i \in \mathbb{N}_0$  heißt **Multiindex**. Es gelten folgende Konventionen:*

$$\begin{aligned} |\alpha| &= \alpha_1 + \dots + \alpha_d \\ \alpha! &= \alpha_1! \dots \alpha_d! \\ x^\alpha &= x_1^{\alpha_1} \dots x_d^{\alpha_d}, \quad x \in \mathbb{R}^d \\ \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} &= \frac{\partial^{\alpha_1}}{\partial x_1^{\alpha_1}} \dots \frac{\partial^{\alpha_d}}{\partial x_d^{\alpha_d}}, \quad x \in \mathbb{R}^d \\ \alpha \geq 0 &\Leftrightarrow \alpha_1 \geq 0 \wedge \dots \wedge \alpha_d \geq 0. \end{aligned}$$

**Bemerkung 3.2.** *Mit Hilfe der Multiindex-Notation lässt sich eine mehrdimensionale Taylor-Entwicklung einer Funktion  $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  mit Entwicklungspunkt  $x_0 \in \mathbb{R}^d$  schreiben als*

$$f(x) = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{(x - x_0)^\alpha}{\alpha!} \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} f(x)|_{x=x_0}.$$

In Abschnitt 3.1.3 wird es bei der Abschätzung der Reihenentwicklungen auch notwendig sein, Ausdrücke mit Fakultäten des Multiindex abzuschätzen. Eine dafür benötigte Aussage liefert das folgende Lemma.

**Lemma 3.10.** *Für Multiindizes  $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$  gilt die Abschätzung*

$$\sqrt{\frac{(\alpha + \beta)!}{\alpha! \beta!}} \leq 2^{|\alpha + \beta|/2}. \quad (3.5)$$

*Beweis.* Die zu zeigende Ungleichung lässt sich auf beiden Seiten in die einzelnen Dimensionen aufspalten:

$$\sqrt{\frac{(\alpha_1 + \beta_1)!}{\alpha_1! \beta_1!}} \cdots \sqrt{\frac{(\alpha_d + \beta_d)!}{\alpha_d! \beta_d!}} \leq 2^{(\alpha_1 + \beta_1)/2} \cdots 2^{(\alpha_d + \beta_d)/2}.$$

Daher genügt es, den eindimensionalen Fall zu betrachten. Die Aussage für eine allgemeine Dimension  $d$  folgt dann aus dem Produkt der eindimensionalen Ungleichungen. Die eindimensionale Ungleichung mit  $a, b \in \mathbb{N}_0$  lautet

$$\sqrt{\frac{(a + b)!}{a! b!}} \leq 2^{(a+b)/2},$$

welche sich nun durch vollständige Induktion zeigen lässt.

Induktionsbasis:  $a = b = 0$ :

$$\sqrt{\frac{(0 + 0)!}{0! 0!}} = 1 = 2^{(0+0)/2}.$$

Induktionsschritt: Für den Induktionsschritt  $a \rightarrow a + 1$  sei nun  $b \leq a + 1$ , dann gilt

$$\frac{(a + 1 + b)!}{(a + 1)! b!} = \frac{(a + 1 + b)(a + b)!}{(a + 1)a! b!} \stackrel{I.V.}{\leq} \frac{a + 1 + b}{a + 1} 2^{a+b} = \underbrace{\left(1 + \frac{b}{a + 1}\right)}_{\leq 2} 2^{a+b} \leq 2^{a+1+b}.$$

Wegen der Symmetrie der Ungleichung in  $a$  und  $b$  lässt sich der Induktionsschritt analog für den Fall  $a \leq b + 1$  und entsprechendem Schritt  $b \rightarrow b + 1$  zeigen. Somit sind alle Kombinationen von  $a$  und  $b$  erreichbar.  $\square$

**Definition 3.11.** *Für  $t \in \mathbb{R}^d$  und  $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$  sind die mehrdimensionalen Hermite-Polynome und Hermite-Funktionen definiert durch*

$$\begin{aligned} H_\alpha(t) &= H_{\alpha_1}(t_1) \cdots H_{\alpha_d}(t_d), \\ h_\alpha(t) &= e^{-|t|^2} H_\alpha(t) = h_{\alpha_1}(t_1) \cdots h_{\alpha_d}(t_d), \end{aligned}$$

mit  $|t|^2 = t_1^2 + \cdots + t_d^2$ .

**Bemerkung 3.3.** Die Symmetrie der eindimensionalen Hermite–Polynome und Hermite–Funktionen überträgt sich direkt auf den mehrdimensionalen Fall, und es gilt

$$H_\alpha(-t) = (-1)^{|\alpha|} H_\alpha(t), \quad t \in \mathbb{R}^d, \alpha \in \mathbb{N}_0^d,$$

$$h_\alpha(-t) = (-1)^{|\alpha|} h_\alpha(t), \quad t \in \mathbb{R}^d, \alpha \in \mathbb{N}_0^d.$$

Die mehrdimensionale Cramer’sche Ungleichung folgt direkt durch Multiplikation der eindimensionalen Ungleichungen.

**Satz 3.12** (Cramer’sche Ungleichung). Für die Hermite–Funktionen gilt

$$|h_\alpha(t)| \leq K^{2|\alpha|/2} \sqrt{\alpha!} e^{-|t|^2/2}, \quad (3.6)$$

mit  $t \in \mathbb{R}^d$ ,  $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$  und einer Konstanten  $K < 1.09$ .

**Satz 3.13** (mehrdimensionale Hermite–Entwicklung). Für  $s, t \in \mathbb{R}^d$  lautet die mehrdimensionale Hermite–Entwicklung einer Gauß–Funktion

$$e^{-|t-s|^2} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{t^\alpha}{\alpha!} h_\alpha(s). \quad (3.7)$$

*Beweis.* Man erhält die mehrdimensionale Hermite–Entwicklung aus dem Produkt der eindimensionalen Hermite–Entwicklungen (3.3)

$$e^{-|t-s|^2} = e^{-|t_1-s_1|^2} \cdots e^{-|t_d-s_d|^2} = \sum_{\alpha_1=0}^{\infty} \frac{t_1^{\alpha_1}}{\alpha_1!} h_{\alpha_1}(s_1) \cdots \sum_{\alpha_d=0}^{\infty} \frac{t_d^{\alpha_d}}{\alpha_d!} h_{\alpha_d}(s_d) = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{t^\alpha}{\alpha!} h_\alpha(s).$$

□

**Bemerkung 3.4.** Analog zum eindimensionalen Fall folgt mit Entwicklungspunkt  $s_0 \in \mathbb{R}^d$  und  $\delta > 0$

$$e^{-|t-s|^2/\delta} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \left( \frac{t-s_0}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_\alpha \left( \frac{s-s_0}{\sqrt{\delta}} \right). \quad (3.8)$$

**Satz 3.14** (Taylor–Entwicklung einer Hermite–Funktion). Die Taylor–Entwicklung mit Entwicklungspunkt  $t_0 \in \mathbb{R}^d$  einer Hermite–Funktion  $h_\alpha$  lautet

$$h_\alpha(t) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{(t-t_0)^\beta}{\beta!} (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta}(t_0). \quad (3.9)$$

*Beweis.* Eine mehrdimensionale Hermite–Funktion hat laut Definition 3.11 die Gestalt

$$h_\alpha(t) = e^{-|t|^2} H_\alpha(t) = (-1)^{|\alpha|} \frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} e^{-|t|^2}.$$

Bildet man nun die partielle Ableitung nach  $\frac{\partial^\beta}{\partial t^\beta}$  und erweitert dann den Ausdruck mit  $(-1)^{|\beta|}(-1)^{|\beta|}$ , erhält man

$$\frac{\partial^\beta}{\partial t^\beta} h_\alpha(t) = \frac{\partial^\beta}{\partial t^\beta} \left[ (-1)^{|\alpha|} \frac{\partial^\alpha}{\partial t^\alpha} e^{-|t|^2} \right] = (-1)^{|\beta|} \underbrace{(-1)^{|\alpha+\beta|} \frac{\partial^{\alpha+\beta}}{\partial t^{\alpha+\beta}} e^{-|t|^2}}_{=h_{\alpha+\beta}(t)} = (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta}(t).$$

Mit der Taylor-Entwicklung aus Bemerkung 3.2 und obigem Resultat für die Ableitung einer Hermite-Funktion, erhält man die gewünschte Reihenentwicklung

$$h_\alpha(t) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{(t-t_0)^\beta}{\beta!} \frac{\partial^\beta}{\partial t^\beta} h_\alpha(t) \Big|_{t=t_0} = \sum_{\beta \geq 0} \frac{(t-t_0)^\beta}{\beta!} (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta}(t_0).$$

□

### 3.1.3 Anwendung der Reihenentwicklungen und Fehlerabschätzungen

In diesem Abschnitt werden die in Abschnitt 3.1.2 eingeführten Hermite- und Taylor-Entwicklungen in die diskrete Gauß-Transformation (2.1) eingesetzt. Durch Abbrechen der Reihenentwicklungen erhält man eine Approximation der diskreten Gauß-Transformation. Es wird dabei immer vorausgesetzt, dass die gegebenen Punkte in einem Quadrat mit gegebener Kantenlänge liegen. Um dies zu gewährleisten, muss, wie bereits in Abschnitt 2.1 beschrieben, das Gebiet in hinreichend kleine Teilgebiete unterteilt werden. Weitere Details dazu in Abschnitt 3.2. Die Abschätzungen werden hier nur für den Fall  $d = 2$  angegeben. Wegen der Produktform der Reihenentwicklungen lassen sie sich aber analog auf höhere Dimensionen übertragen.

Das folgende Lemma liefert eine zentrale Abschätzung einer Hermite-Entwicklung, auf die im Weiteren mehrfach zurückgegriffen wird.

**Lemma 3.15.** *Für den Reihenrest  $E(p)$  einer abgebrochenen Hermite-Entwicklung*

$$h_0(x-y) = e^{-|x-y|^2} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} h_\alpha(x) y^\alpha = \sum_{\alpha \leq p} \frac{1}{\alpha!} h_\alpha(x) y^\alpha + E(p) \quad (3.10)$$

*gilt für  $d = 2$ ,  $x \in \mathbb{R}^2$ ,  $y \in \mathbb{R}^2$ ,  $|y_i| \leq r$  und  $r\sqrt{2} \leq 1$  die Abschätzung*

$$|E(p)| \leq K^2 C \frac{1}{1 - \sqrt{\eta}} \left( \frac{2er^2}{p+1} \right)^{(p+1)/2},$$

*mit  $K < 1.09$ ,  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{1/4}$  und  $\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$ .*

*Beweis.* Nach (3.7) lautet die Hermite–Entwicklung einer Gauß–Funktion mit  $x, y \in \mathbb{R}^2$

$$e^{-|x-y|^2} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} h_\alpha(x) y^\alpha.$$

Wird diese Reihe nach  $(p+1)^2$  Termen abgebrochen, lautet der abzuschätzende Reihenrest  $E(p)$

$$|E(p)| = \left| \sum_{\exists \alpha_i \geq p} \frac{1}{\alpha!} h_\alpha(x) y^\alpha \right| \leq \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{1}{\alpha!} |h_\alpha(x)| |y^\alpha|.$$

Die Hermite–Funktion kann mittels der Cramer’schen Ungleichung (3.6) für  $d = 2$  abgeschätzt werden:

$$\frac{1}{\alpha!} |h_\alpha(x)| \leq \frac{1}{\alpha!} K^2 2^{|\alpha|/2} \sqrt{\alpha!} \underbrace{\left| e^{-|x|^2/2} \right|}_{\leq 1} \leq K^2 \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}},$$

mit  $K < 1.09$ . Der  $y^\alpha$  Term kann wegen  $|y_i| \leq r$  abgeschätzt werden durch

$$|y^\alpha| = |y_1^{\alpha_1} \cdots y_d^{\alpha_d}| = |y_1|^{\alpha_1} \cdots |y_d|^{\alpha_d} \leq r^{\alpha_1} \cdots r^{\alpha_d} = r^{|\alpha|},$$

und man erhält insgesamt

$$|E(p)| \leq K^2 \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|}.$$

Durch Aufspaltung der Reihe in die einzelnen Dimensionen und wegen der Symmetrie der ersten beiden Terme erhält man

$$\begin{aligned} K^2 \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} &= \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \sum_{\alpha_2=0}^p K^2 \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} + \sum_{\alpha_1=0}^p \sum_{\alpha_2=p+1}^{\infty} K^2 \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} \\ &+ \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \sum_{\alpha_2=p+1}^{\infty} K^2 \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} \\ &= 2K^2 \underbrace{\sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \sum_{\alpha_2=0}^p \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|}}_{=:I} + K^2 \underbrace{\sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \sum_{\alpha_2=p+1}^{\infty} \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|}}_{=:II}. \end{aligned}$$

Nun werden diese beiden Terme abgeschätzt.

### Term I

Term I lässt sich als Produkt von zwei Reihen schreiben:

$$I = \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \sum_{\alpha_2=0}^p \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} = \underbrace{\sum_{\alpha_2=0}^p \frac{2^{\alpha_2/2}}{\sqrt{\alpha_2!}} r^{\alpha_2}}_{=:A} \underbrace{\sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \frac{2^{\alpha_1/2}}{\sqrt{\alpha_1!}} r^{\alpha_1}}_{=:B}.$$

Term  $A$  lässt sich mit Hilfe der harmonischen Reihe abschätzen. Um eine Abschätzung unabhängig von  $r$  zu erhalten, muss  $r$  nach oben beschränkt werden. Sei nun  $r\sqrt{2} \leq 1$ , für  $\alpha_2 \geq 7$  gilt  $1/\sqrt{\alpha_2!} < 1/\alpha_2^2$ , womit für Term  $A$  folgt:

$$\begin{aligned} A &= \sum_{\alpha_2=0}^p \frac{(r\sqrt{2})^{\alpha_2}}{\sqrt{\alpha_2!}} \leq \sum_{\alpha_2=0}^p \frac{1}{\sqrt{\alpha_2!}} < \sum_{\alpha_2=0}^6 \frac{1}{\sqrt{\alpha_2!}} + \sum_{\alpha_2=7}^p \frac{1}{\alpha_2^2} \\ &= \underbrace{\sum_{\alpha_2=0}^6 \frac{1}{\sqrt{\alpha_2!}}}_{<3.45} + \underbrace{\sum_{\alpha_2=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_2^2}}_{=\frac{\pi^2}{6} < 1.65} - \underbrace{\sum_{\alpha_2=1}^6 \frac{1}{\alpha_2^2}}_{>1.49} < 3.61. \end{aligned}$$

Für die Abschätzung von Term  $B$  wird die Fakultät durch die Stirling-Formel (siehe [1, Formel 6.1.38])

$$n! = \sqrt{2\pi n} n^{n+\frac{1}{2}} \exp\left(-n + \frac{\theta}{12n}\right), \quad n > 0, \theta \in (0, 1)$$

abgeschätzt. Der Kehrwert dieser Formel lässt sich mit  $\theta = 0$  nach oben abschätzen durch

$$\frac{1}{n!} = \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \frac{1}{n^n} \exp\left(n - \frac{\theta}{12n}\right) \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \frac{e^n}{n^n}.$$

Setzt man  $n = \alpha_1$  und zieht die Wurzel, so erhält man wegen  $\alpha_1 \geq p+1$

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha_1!}} \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \underbrace{\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{1/4}}_{\leq 1} \left(\frac{e}{\alpha_1}\right)^{\alpha_1/2} \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{e}{p+1}\right)^{\alpha_1/2}. \quad (3.11)$$

Somit ergibt sich für Term  $B$  die Abschätzung

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \frac{2^{\alpha_1/2}}{\sqrt{\alpha_1!}} r^{\alpha_1} \leq \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{\alpha_1/2} \\ &\leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2} \sum_{\alpha_1=0}^{\infty} \underbrace{\left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{\alpha_1/2}}_{=: \eta}. \end{aligned}$$

Die unendliche Reihe entspricht einer geometrischen Reihe, deren Grenzwert  $\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}$  für  $\eta < 1$  ist. Somit gilt für Term  $B$  die Abschätzung

$$B \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1-\sqrt{\eta}}, \quad \text{für } \eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1.$$

Insgesamt ergibt sich für Term I dann die Abschätzung

$$I \leq 3.61 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{1-\sqrt{\eta}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2},$$

unter den Voraussetzungen  $r\sqrt{2} \leq 1$  und  $\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$ .

**Term II**

Auch Term II lässt sich als Produkt von zwei Reihen aufspalten, die sich analog zu Term B abschätzen lassen:

$$\text{II} = \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \frac{2^{\alpha_1/2}}{\sqrt{\alpha_1!}} r^{\alpha_1} \cdot \sum_{\alpha_2=p+1}^{\infty} \frac{2^{\alpha_2/2}}{\sqrt{\alpha_2!}} r^{\alpha_2} \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}\right)^2 \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)},$$

für  $\eta < 1$ . Insgesamt erhält man somit für  $r\sqrt{2} < 1$  und  $\eta < 1$

$$\begin{aligned} |E(p)| &\leq K^2 \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{2^{|\alpha|/2}}{\sqrt{\alpha!}} r^{|\alpha|} \leq 2K^2 \cdot 3.61 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{1-\sqrt{\eta}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2} \\ &\quad + K^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}\right)^2 \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)} \\ &\leq \left(2 \cdot 3.61 + \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4}\right) K^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \underbrace{\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}}_{<1} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2}, \end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt die Abschätzung

$$\left(\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}\right)^2 \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)} \leq \frac{1}{1-\sqrt{\eta}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2}$$

verwendet wurde. □

**Bemerkung 3.5.** Die Voraussetzung  $\eta < 1$  ist wegen  $r\sqrt{2} \leq 1 \Leftrightarrow 2r^2 \leq 1$  für  $p \geq 2$  automatisch erfüllt:

$$\eta = \frac{2er^2}{p+1} \leq \frac{e}{p+1} \leq \frac{e}{3} < 1.$$

**Bemerkung 3.6.** Term B aus obigem Beweis lässt sich alternativ auch mit Stirling–Formel und  $r\sqrt{2} < 1$  abschätzen:

$$\begin{aligned} B &= \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} \frac{2^{\alpha_1/2}}{\sqrt{\alpha_1!}} r^{\alpha_1} \leq \frac{1}{\sqrt{(p+1)!}} \sum_{\alpha_1=p+1}^{\infty} (r\sqrt{2})^{\alpha_1} = \frac{(r\sqrt{2})^{p+1}}{\sqrt{(p+1)!}} \sum_{\alpha_1=0}^{\infty} (r\sqrt{2})^{\alpha_1} \\ &\leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{1-r\sqrt{2}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2}. \end{aligned}$$

Als gesamte Abschätzung des Reihenrestes  $E(p)$  erhält man dann

$$\begin{aligned} |E(p)| &\leq 2K^2 \cdot 3.61 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{1-r\sqrt{2}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2} \\ &\quad + K^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{1}{1-r\sqrt{2}}\right)^2 \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)} \\ &\leq \left(2 \cdot 3.61 + \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4}\right) K^2 \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \frac{1}{1-r\sqrt{2}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2}, \end{aligned}$$

mit der einzigen Voraussetzung  $r\sqrt{2} < 1$ . Diese Abschätzung ist etwas schlechter, da der Term  $\frac{1}{1-r\sqrt{2}}$  konstant ist, und nicht wie  $\frac{1}{1-\sqrt{\eta}}$  für  $p \rightarrow \infty$  gegen 1 geht.

**Bemerkung 3.7.** Bei der Abschätzung der Fakultät in Gleichung (3.11) wurde der Term  $\left(\frac{1}{\alpha_1}\right)^{1/4}$  vernachlässigt. Wird er mit berücksichtigt, so ergibt sich für  $p \geq 6$  die etwas bessere Abschätzung

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha_1!}} \leq \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{e}{p+2}\right)^{\alpha_1/2}.$$

Insgesamt erhält man damit

$$|E(p)| = \mathcal{O}\left(\frac{2er^2}{p+2}\right)^{(p+1)/2}.$$

Diese Abschätzung wird in der Arbeit "Fast Adaptive Methods For The Free-Space Heat Equation" von J. Strain [17] ohne Beweis angegeben.

Um den Einfluss einer Quellbox  $B$  zu einer Zielbox  $C$  effizient auszuwerten, wird die diskrete Gauß-Transformation in dieser Quellbox durch eine Hermite-Entwicklung ersetzt. Wie diese Hermite-Entwicklung aussieht und wie groß der Fehler durch das Abbrechen der unendlichen Reihe ist, beschreibt der folgende Satz.

**Satz 3.16.** Gegeben seien die Quellen  $s_j$  mit Gewichten  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N_B$ , die in einem Quadrat  $B \subset \mathbb{R}^2$  mit Zentrum  $s_B$  und Kantenlänge  $2r\sqrt{\delta}$  mit  $r\sqrt{2} \leq 1$  liegen. Dann lautet die Hermite-Entwicklung der diskreten Gauß-Transformation (2.1)

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right), \quad (3.12)$$

wobei  $A_\alpha$  gegeben ist durch

$$A_\alpha = \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \left(\frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}}\right)^\alpha. \quad (3.13)$$

Wird die Hermite-Entwicklung (3.12) nach  $(p+1)^2$  Termen abgebrochen, erhält man

$$G(t) = \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right) + E_H(p). \quad (3.14)$$

Für den Reihenrest  $E_H(p)$  gilt die Abschätzung

$$|E_H(p)| \leq QK^2C \frac{1}{1-\sqrt{\eta}} \left(\frac{2er^2}{p+1}\right)^{(p+1)/2},$$

mit  $K < 1.09$ ,  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4}$ ,  $\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$  und  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$ .

*Beweis.* Eine Gauß–Funktion lässt sich via (3.7) in eine Hermite–Reihe entwickeln durch

$$e^{-|t-s_j|^2/\delta} = e^{-|t-s_B+s_B-s_j|^2/\delta} = e^{-\left|\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}} - \frac{s_j-s_B}{\sqrt{\delta}}\right|^2} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\delta}}\right)^\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right).$$

Die Hermite–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation lautet damit

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \underbrace{\sum_{j=1}^{N_B} q_j \left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\delta}}\right)^\alpha}_{=: A_\alpha} h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right).$$

Der abzuschätzende Reihenrest  $E_H(p)$  ist dann

$$E_H(p) = \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\delta}}\right)^\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right).$$

Da die Quellen  $s_j$  in einem Quadrat mit Kantenlänge  $2r\sqrt{\delta}$  liegen, gilt komponentenweise

$$|y_i| = \left| \frac{s_j[i] - s_B[i]}{\sqrt{\delta}} \right|, \quad \text{für } i = 1, 2.$$

Damit erhält man die Abschätzung

$$\left| \left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\delta}}\right)^\alpha \right| = \left| \left(\frac{s_j[1]-s_B[1]}{\sqrt{\delta}}\right)^{\alpha_1} \dots \left(\frac{s_j[d]-s_B[d]}{\sqrt{\delta}}\right)^{\alpha_d} \right| \leq r^{|\alpha|},$$

womit alle Voraussetzungen von Lemma 3.15 erfüllt sind. Die Abschätzung von  $E(p)$  folgt direkt durch Anwendung des Lemmas.  $\square$

Statt die diskrete Gauß–Transformation bezüglich der Quellen einer Quellbox  $B$  in einer Hermite–Reihe zu entwickeln, ist es auch möglich, bezüglich der Zielpunkte in einer Box  $C$  eine Taylor–Reihe zu bilden. Wie diese Entwicklung aussieht und wie groß der Fehler durch das Abbrechen der Reihe ist, beschreibt der folgende Satz. Das Resultat wird in weiterer Folge auch für die Abschätzung der Transformation einer endlichen Hermite–Entwicklung in eine Taylor–Entwicklung (siehe Satz 3.18) benötigt.

**Satz 3.17.** *Für die Hermite–Entwicklung (3.12) aus Satz 3.16*

$$G(t) = \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\delta}}\right)$$

mit  $A_\alpha$  aus (3.13) lautet die Taylor–Entwicklung um einen Punkt  $t_C \in \mathbb{R}^d$

$$G(t) = \sum_{\beta \geq 0} B_\beta \left(\frac{t-t_C}{\sqrt{\delta}}\right)^\beta, \quad (3.15)$$

mit

$$B_\beta = \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right). \quad (3.16)$$

Wird die Taylor-Entwicklung nach  $(p+1)^2$  Termen abgebrochen, erhält man

$$G(t) = \sum_{\beta \leq p} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_T(p). \quad (3.17)$$

Für den Reihenrest  $E_T(p)$  in einem Quadrat  $C$  mit Zentrum  $t_C$  und Kantenlänge  $2r\sqrt{\delta}$  gilt die Abschätzung

$$|E_T(p)| \leq QK^2C \frac{1}{1 - \sqrt{\eta}} \left( \frac{2er^2}{p+1} \right)^{(p+1)/2},$$

mit  $K < 1.09$ ,  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{1/4}$ ,  $r\sqrt{2} \leq 1$ ,  $\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$  und  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$ .

*Beweis.* Die Taylor-Entwicklung einer Hermite-Funktion lautet nach (3.9)

$$h_\alpha(x) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{(x - x_0)^\beta}{\beta!} (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta}(x_0),$$

mit  $x, x_0 \in \mathbb{R}^d$  und  $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$ . Setzt man nun  $x = \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}}$  und  $x_0 = \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}}$ , dann erhält man wegen

$$x - x_0 = \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} - \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} = \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}}$$

für die Hermite-Funktionen aus (3.12) die Taylor-Entwicklungen

$$h_\alpha \left( \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{1}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right), \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d.$$

Setzt man nun diese Reihenentwicklungen der Hermite-Funktionen in die Hermite-Entwicklung (3.12) der diskreten Gauß-Transformation ein, so erhält man

$$G(t) = \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha \sum_{\beta \geq 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta.$$

Durch Vertauschung der Summationsreihenfolge erhält man daraus die gewünschte Taylor-Entwicklung

$$G(t) = \sum_{\beta \geq 0} \underbrace{\frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)}_{=: B_\beta} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta = \sum_{\beta \geq 0} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta.$$

Wird diese Reihenentwicklung nach  $(p + 1)^2$  Termen abgebrochen, ergibt sich für den abzuschätzenden Reihenrest  $E_T(p)$

$$E_T(p) = G(t) - \sum_{\beta \leq p} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta = \sum_{\exists \beta_i > p} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta.$$

Durch Umsortierung von  $E_T(p)$  erhält man mit  $A_\alpha$  aus (3.13)

$$\begin{aligned} E_T(p) &= \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \geq 0} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\ &= \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\ &= \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \underbrace{\sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)}_{=:(*)} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta. \end{aligned}$$

Um hier den Ausdruck  $(*)$  weiter umzuformen, kann man die Taylor–Entwicklung von  $h_\beta$  betrachten. Mit Entwicklungspunkt  $x_0 = \frac{s_B - t_C}{\sqrt{\delta}}$  und Auswertungspunkt  $x = \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}}$  lautet wegen

$$x - x_0 = \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} - \frac{s_B - t_C}{\sqrt{\delta}} = \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}}$$

die Taylor–Entwicklung (3.9) von  $h_\beta$

$$h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) = \sum_{\alpha \geq 0} \frac{(-1)^{|\alpha|}}{\alpha!} \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{s_B - t_C}{\sqrt{\delta}} \right), \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d.$$

Wegen der Symmetrie der Hermite–Funktionen (Bem. 3.1)

$$h_\alpha(-x) = (-1)^{|\alpha|} h_\alpha(x), \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d, x \in \mathbb{R}^d,$$

lässt sich diese Darstellung umformen auf

$$h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) = (-1)^{|\beta|} \sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right), \quad \alpha \in \mathbb{N}_0^d.$$

Somit lässt sich Ausdruck  $(*)$  in obiger Darstellung von  $E_T(p)$  durch

$$(-1)^{|\beta|} h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)$$

ersetzen, und man erhält

$$E_T(p) = \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j (-1)^{|\beta|} h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta.$$

Dieser Ausdruck lässt sich nun abschätzen durch

$$\begin{aligned} |E_T(p)| &= \left| \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \right| \\ &\leq \sum_{\exists \beta_i > p} \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} |q_j| \left| h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \right| \cdot \left| \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \right|. \end{aligned}$$

Durch Anwendung von Lemma 3.15 folgt nun die Fehlerabschätzung.  $\square$

Für die Berechnung der Koeffizienten  $B_\beta$  einer Taylor-Entwicklung ist nach obigem Satz 3.17 eine unendliche Summe über  $\alpha$  zu bilden. Die Koeffizienten  $B_\beta$  lassen sich aber auch direkt aus der Taylor-Entwicklung berechnen.

**Bemerkung 3.8.** In der Reihenentwicklung (3.15)

$$G(t) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j (-1)^{|\beta|} \underbrace{\sum_{\alpha \geq 0} \frac{1}{\alpha!} \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)}_{(*)} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta$$

kann  $(*)$  durch eine Taylor-Entwicklung von  $h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)$  ausgedrückt werden, womit für die diskrete Gauß-Transformation  $G$  die Darstellung

$$G(t) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta = \sum_{\beta \geq 0} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta,$$

mit

$$B_\beta = \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \quad (3.18)$$

folgt. Man erhält diese Darstellung auch, wenn man in der diskreten Gauß-Transformation (2.1)

$$G(t) = \sum_{j=1}^N e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{j=1}^N h_0 \left( \frac{t - s_j}{\sqrt{\delta}} \right)$$

die Hermite-Funktion  $h_0$  nach Formel (3.9) in eine Taylor-Reihe entwickelt.

In den vorangegangenen Sätzen 3.16 und 3.17 wurde beschrieben, wie die diskrete Gauß–Transformation in eine einfache Hermite– oder Taylor–Reihe entwickelt werden kann. Es ist aber auch möglich diese beiden Reihenentwicklungen zu kombinieren, indem man die abgebrochene Hermite–Entwicklung aus Satz 3.16 in eine Taylor–Reihe umrechnet. Die Details und eine entsprechende Fehlerabschätzung liefert der folgende Satz.

**Satz 3.18.** *Die Taylor–Entwicklung einer abgebrochenen Hermite–Entwicklung (3.14) der diskreten Gauß–Transformation lautet*

$$G_H(t) = \sum_{\beta \geq 0} C_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta, \quad (3.19)$$

mit

$$C_\beta = \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right), \quad (3.20)$$

und  $A_\alpha$  aus (3.13). Wird auch die Taylor–Reihe nach  $(p+1)^2$  Termen abgebrochen, erhält man

$$G_H(t) = \sum_{\beta \leq p} C_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_{HT}(p). \quad (3.21)$$

Für den Reihenrest  $E_{HT}(p)$  gilt die Abschätzung

$$|E_{HT}(p)| \leq QK^2C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\eta}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)},$$

mit  $\tilde{\eta} = 2\eta = \frac{4er^2}{p+1} < 1$ ,  $2r \leq 1$ ,  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$ ,  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{1/4}$  und  $K < 1.09$ .

*Beweis.* Analog zum Beweis von Satz 3.17 können die Hermite–Funktionen  $h_\alpha$  in der abgebrochenen Hermite–Entwicklung (3.14)

$$G_H(t) = \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_\alpha \left( \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)$$

in eine Taylor–Reihe entwickelt werden:

$$h_\alpha \left( \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) = \sum_{\beta \geq 0} \frac{1}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta (-1)^{|\beta|} h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right),$$

und man erhält

$$\begin{aligned} G_H(t) &= \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha \sum_{\beta \geq 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \\ &= \sum_{\beta \geq 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \underbrace{\sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)}_{=: C_\beta} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta. \end{aligned}$$

Wird diese Reihenentwicklung nach  $(p + 1)^2$  Termen abgebrochen, erhält man als abzuschätzenden Reihenrest

$$\begin{aligned}
E_{HT}(p) &= G_H(t) - \sum_{\beta \leq p} C_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\
&= \sum_{\alpha \leq p} \sum_{\beta \geq 0} A_\alpha \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \\
&\quad - \sum_{\alpha \leq p} \sum_{\beta \leq p} A_\alpha \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \\
&= \sum_{\alpha \leq p} \sum_{\exists \beta_i > p} A_\alpha \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right).
\end{aligned}$$

Der Reihenrest lässt sich als Differenz von zwei Reihen schreiben

$$\begin{aligned}
E_{HT}(p) &= \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\alpha \leq p} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\
&= \sum_{\exists \beta_i > p} \left( \sum_{\alpha \geq 0} - \sum_{\exists \alpha_i > p} \right) \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\
&= \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\alpha \geq 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\
&\quad - \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \\
&= \sum_{\exists \beta_i > p} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta - \underbrace{\sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta}_{=: E_2} \\
&= E_T(p) - E_2.
\end{aligned}$$

Für die erste Reihe kann die Abschätzung aus Satz 3.17 verwendet werden, und man erhält

$$|E_T(p)| \leq QK^2C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}},$$

mit  $K < 1.09$ ,  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{1/4}$ ,  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} q_j$  und den Voraussetzungen  $r\sqrt{2} \leq 1$

und  $\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$ . Die zweite Reihe  $E_2$  lässt sich abschätzen durch

$$\begin{aligned} |E_2| &\leq \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} \frac{1}{\alpha! \beta!} \underbrace{\sum_{j=1}^{N_B} q_j}_{=Q} \underbrace{\left| \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha \right|}_{\leq r^{|\alpha|}} \underbrace{\left| \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta \right|}_{\leq r^{|\beta|}} \left| h_{\alpha+\beta} \left( \frac{s_B - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \right| \\ &\leq Q \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} \frac{1}{\alpha! \beta!} r^{|\alpha+\beta|} \left| h_{\alpha+\beta} \left( \frac{s_B - t_C}{\sqrt{\delta}} \right) \right| \\ &\leq Q \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} \frac{1}{\alpha! \beta!} r^{|\alpha+\beta|} K^2 \sqrt{(\alpha + \beta)!} 2^{|\alpha+\beta|/2}. \end{aligned}$$

In Lemma 3.10 wurde gezeigt, dass

$$\sqrt{\frac{(\alpha + \beta)!}{\alpha! \beta!}} \leq 2^{|\alpha+\beta|/2}$$

gilt, womit sich  $E_2$  weiter abschätzen lässt durch

$$|E_2| \leq Q \sum_{\exists \beta_i > p} \sum_{\exists \alpha_i > 0} r^{|\alpha+\beta|} K^2 \frac{1}{\sqrt{\alpha! \beta!}} 2^{|\alpha+\beta|} = QK^2 \sum_{\exists \alpha_i > p} \frac{(2r)^{|\alpha|}}{\sqrt{\alpha!}} \cdot \sum_{\exists \beta_i > 0} \frac{(2r)^{|\beta|}}{\sqrt{\beta!}}.$$

Das Produkt dieser Reihen lässt sich nun analog zum Beweis von Lemma 3.15 mit Hilfe der Stirling–Formel abschätzen, und man erhält

$$|E_2| \leq QK^2 C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)}.$$

Der einzige Unterschied ist, dass hier nun  $2r$  statt  $\sqrt{2}r$  im Zähler steht, wodurch sich die neuen Bedingungen  $2r \leq 1$  und  $\tilde{\eta} = 2\eta = \frac{4er^2}{p+1} < 1$  ergeben. Insgesamt ergibt sich somit

$$|E_{HT}(p)| \leq |E_T(p)| + |E_2| \leq QK^2 C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2 C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)}.$$

□

Der obige Satz beschreibt nur den Fehler, der durch Anwendung einer abgebrochenen Taylor–Entwicklung auf eine bereits abgebrochenen Hermite–Entwicklung entsteht. Wie groß dann der Fehler zur ursprünglichen Funktion ist, wird in folgendem Lemma angegeben.

**Lemma 3.19.** *Sei  $G_H$  die abgebrochenen Hermite–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation  $G$  nach Satz 3.16 und  $G_{HT}$  die abgebrochene Taylor–Entwicklung von  $G_H$  nach Satz 3.18. Für den Gesamtfehler, der durch Anwendung von abgebrochenen Hermite– und Taylor–Entwicklungen entsteht, gilt dann*

$$|G(t) - G_{HT}(t)| \leq 2 \cdot QK^2 C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2 C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)}.$$

*Beweis.* Durch Anwendung der Dreiecksungleichung folgt mit den Fehlerabschätzungen aus den Sätzen 3.16 und 3.18

$$\begin{aligned} |G(t) - G_{HT}(t)| &= |G(t) - G_H(t) + G_H(t) - G_{HT}(t)| \leq |G(t) - G_H(t)| + |G_H(t) - G_{HT}(t)| \\ &\leq QK^2C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)} \\ &= 2 \cdot QK^2C \frac{\eta^{(p+1)/2}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)}. \end{aligned}$$

□

### 3.1.4 Zusammenfassung

Für die Auswertung eines Quadrates  $B$  mit  $N_B$  Quellen in einem Zielquadrat  $C$  mit  $M_C$  Punkten gibt es nun 4 Möglichkeiten:

1.  $N_B$  Quellen  $\rightarrow$  direkte Auswertung in  $M_C$  Punkten nach Formel (2.1)
2. Hermite-Entwicklung  $\rightarrow$  direkte Auswertung in  $M_C$  Punkten nach Formel (3.14)
3.  $N_B$  Quellen  $\rightarrow$  Taylor-Entwicklung nach Formel (3.17)
4. Hermite-Entwicklung  $\rightarrow$  Taylor-Entwicklung nach Formel (3.21)

Für gegebene Quellen  $s_j$  und Gewichte  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N_B$  in einem Quadrat  $B \subset \mathbb{R}^2$  mit Mittelpunkt  $s_B$ , und Auswertungspunkt  $t$  in einem Quadrat  $C \subset \mathbb{R}^2$  mit Mittelpunkt  $t_C$ , wobei die Quadrate jeweils eine Kantenlänge  $2r\sqrt{\delta}$  haben, sind somit folgende Reihenentwicklungen möglich:

#### Hermite-Entwicklung (Satz 3.16)

$$G(t) = \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_\alpha \left( \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) + E_H(p),$$

mit

$$A_\alpha = \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha.$$

#### Taylor-Entwicklung (Satz 3.17)

$$G(t) = \sum_{\beta \leq p} B_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_T(p),$$

mit

$$B_\beta = \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right).$$

**Hermite– und Taylor–Entwicklung (Satz 3.18)**

$$G(t) = \sum_{\beta \leq p} C_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_{HT}(p) + E_H(p),$$

mit

$$C_\beta = \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right),$$

und  $A_\alpha$  wie oben.

**Fehlerabschätzungen**

Für die Fehler  $E_H(p)$  und  $E_T(p)$  gilt nach den Sätzen 3.16 und 3.17 die Abschätzung

$$|E_H(p)| = |E_T(p)| \leq QK^2C \frac{\eta^{\frac{p+1}{2}}}{1 - \sqrt{\eta}},$$

mit  $K < 1.09$ ,  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$  und  $C = (2 \cdot 3.61 + 1) \left( \frac{1}{2\pi} \right)^{1/4}$  und den Bedingungen

$\eta = \frac{2er^2}{p+1} < 1$  und  $r\sqrt{2} \leq 1$ . Für den Fehler bei Hermite– und Taylor–Entwicklung gilt nach Satz 3.18

$$|E_{HT}(p) + E_H(p)| \leq 2 \cdot QK^2C \frac{\eta^{\frac{p+1}{2}}}{1 - \sqrt{\eta}} + QK^2C^2 \left( \frac{1}{1 - \sqrt{\tilde{\eta}}} \right)^2 \tilde{\eta}^{(p+1)}$$

mit den neuen Bedingungen  $2r \leq 1$  und  $\tilde{\eta} = 2\eta = \frac{4er^2}{p+1} < 1$ .

Bei allen Fehlerabschätzungen in diesem Kapitel wurde vorausgesetzt, dass die Quellen in einem Quadrat  $B$  mit Kantenlänge  $2r\sqrt{\delta}$  liegen. Für den Gesamtfehler mit Berücksichtigung aller Quadrate ist beim Faktor  $Q$  die Summe über alle Gewichte zu bilden.

**3.2 Algorithmus der schnellen Gauß–Transformation**

In diesem Abschnitt wird ein Algorithmus beschrieben, um die in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen Approximationsmethoden auf die diskrete Gauß–Transformation anzuwenden. Dieser Algorithmus wurde bereits in [7] angeführt.

**3.2.1 Wahl der Parameter**

Für die Berechnung der diskreten Gauß–Transformation (2.1) sind die Punkte  $s_j, t_i \in \mathbb{R}^d$ , die Gewichte  $q_j \in \mathbb{R}$  und der Skalierungsfaktor  $\delta > 0$  gegeben. Es kann vorausgesetzt

werden, dass die gegebenen Punkte in  $[0, 1]^d$  liegen, was – falls nötig – durch eine Modifikation des Skalierungsfaktors  $\delta$  erreicht wird. Außerdem soll bei der Approximation eine gewünschte Genauigkeit  $\varepsilon$  erreicht werden. Abhängig von  $\delta$  und  $\varepsilon$  müssen nun die Parameter  $r$ ,  $p$  und  $n$  für den Algorithmus gewählt werden.

Die 3 Parameter haben folgende Bedeutung:

- $r$  beschreibt die Größe der Boxen, deren Seitenlänge gegeben ist durch  $2r\sqrt{\delta}$ , und hat somit einen Einfluss auf die Gesamtanzahl  $N_{Box}$  der Boxen.
- $p$  ist der maximale Entwicklungsgrad der verwendeten Reihenentwicklungen (3.14), (3.17) und (3.21).
- $n$  beschreibt die Anzahl der Boxen, die bei der Auswertung einer Reihenentwicklung berücksichtigt werden (siehe Abschnitt 2.3).

Zuerst muss der Parameter  $r$  so gewählt werden, dass die Konvergenzbedingungen der Fehlerabschätzungen aus Kapitel 3.1.3 erfüllt sind. Für eine Hermite- oder Taylor-Entwicklung muss  $r\sqrt{2} \leq 1$  gelten (siehe Satz 3.16 und Satz 3.17). Bei einer kombinierten Hermite- und Taylor-Entwicklung hat man die Bedingung  $2r \leq 1$  (siehe Satz 3.18). Die Bedingungen  $\eta < 1$  bzw.  $\tilde{\eta} < 1$  sind auch zu berücksichtigen, können aber auch durch einen entsprechend großen Entwicklungsgrad ( $p \geq 2$  bzw.  $p \geq 5$ ) erfüllt werden. Mit der Wahl von  $r$  ist die Kantenlänge  $s$  der Boxen gegeben durch  $s = 2r\sqrt{\delta}$ , womit sich die Gesamtanzahl der Boxen  $N_{Box}$  ergibt.

Nun müssen der Parameter  $p$  für den Entwicklungsgrad der verwendeten Reihenentwicklung und der Parameter  $n$  für die Anzahl der zu inkludierenden Nahfeldboxen so gewählt werden, dass, entsprechend den Fehlerabschätzungen aus den Abschnitten 2.3 und 3.1.3, die gewünschte Genauigkeit von  $\varepsilon$  erreicht wird. Die beiden Parameter können dabei unabhängig voneinander gewählt werden und der Gesamtfehler ergibt sich dann aus der Summe der Einzelfehler.

### 3.2.2 Rechenaufwandsanalyse

Sei  $N_{Box}$  die Gesamtanzahl der Boxen, die durch Unterteilung des ursprünglichen Gebietes entstehen, und  $(2n + 1)^d$  die Anzahl der Nahfeldboxen die, wie im Abschnitt 2.3 beschrieben, tatsächlich für die Berechnung verwendet werden. Außerdem wird im Folgenden mit  $N_B$  die Anzahl an Quellen in einer Quellbox und mit  $M_C$  die Anzahl an Zielen in einer Zielbox bezeichnet. Dann ergeben sich für die Auswertung der einzelnen Reihenentwicklungen folgende Rechenaufwände:

#### 1. Direkte Auswertung

Für die direkte Auswertung muss die Summe über alle  $N$  Quellpunkte

$$G(t) = \sum_{j=1}^N q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta}$$

in allen  $M$  Zielpunkten ausgewertet werden. Der Aufwand dafür ist

$$\mathcal{O}(NM).$$

## 2. Hermite–Entwicklung

Für die Hermite–Entwicklung muss die Reihe

$$G(t) = \sum_B \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha(B) h_\alpha \left( \frac{t - s_B}{\sqrt{\delta}} \right) + E_H(p),$$

mit

$$A_\alpha(B) = \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j \left( \frac{s_j - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha$$

aufgestellt und ausgewertet werden. Der Aufwand für die Berechnung der Koeffizienten  $A_\alpha$  beträgt pro Box  $\mathcal{O}((p+1)^d N_B)$  und somit insgesamt  $\mathcal{O}((p+1)^d N)$ . Die Auswertung der Reihe in einer Zielbox  $C$  benötigt  $\mathcal{O}((p+1)^d M_C)$  Operationen. Da nach Abschnitt 2.3 nur die  $(2n+1)^d$  nächsten Boxen berücksichtigt werden, ist der Aufwand somit  $\mathcal{O}((2n+1)^d (p+1)^d M)$ , was zu einem Gesamtaufwand von

$$\mathcal{O}((p+1)^d N) + \mathcal{O}((2n+1)^d (p+1)^d M)$$

führt.

## 3. Taylor–Entwicklung

Für die Taylor–Entwicklung muss die Reihe

$$G(t) = \sum_B \sum_{\beta \leq p} B_\beta(B) \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_T(p),$$

mit

$$B_\beta(B) = \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_B} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)$$

aufgestellt und ausgewertet werden. Der Aufwand für die Berechnung der Koeffizienten  $B_\beta$  beträgt pro Box  $\mathcal{O}((p+1)^d N_B)$ . Da nur die  $(2n+1)^d$  nächsten Boxen berücksichtigt werden, beträgt der Aufwand insgesamt  $\mathcal{O}((2n+1)^d (p+1)^d N)$ . Die Auswertung der Reihe in einer Box benötigt  $\mathcal{O}((p+1)^d M_C)$  Operationen, was insgesamt zu einem Aufwand von  $\mathcal{O}((p+1)^d M)$  führt. Der Gesamtaufwand ist somit

$$\mathcal{O}((2n+1)^d (p+1)^d N) + \mathcal{O}((p+1)^d M).$$

## 4. Hermite– und Taylor–Entwicklung

Für die Hermite– und Taylor–Entwicklung muss die Reihe

$$G(t) = \sum_{\beta \leq p} C_\beta \left( \frac{t - t_C}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta + E_{HT}(p) + E_H(p),$$

mit

$$C_\beta = \frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!} \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{t_C - s_B}{\sqrt{\delta}} \right)$$

aufgestellt und ausgewertet werden. Für die Berechnung der Koeffizient  $A_\alpha$  und die Auswertung der Reihe ergeben sich, wie bereits beschrieben, ein Aufwand von  $\mathcal{O}((p+1)^d N) + \mathcal{O}((p+1)^d M)$ .

Für die Berechnung der Koeffizienten  $C_\beta$  kann die Produktform der Hermite-Funktionen  $h_{\alpha+\beta}$  ausgenutzt werden. Die Anzahl der Rechenoperationen für eine allgemeine Dimension  $d$  wird leichter ersichtlich, wenn man sich zuerst die Fälle  $d = 2$  und  $d = 3$  ansieht.

**Fall  $d = 2$ :** Durch Ausnutzung der Produktform der mehrdimensionalen Hermite-Funktionen erhält man für  $C_\beta$

$$C_{\beta_1, \beta_2} = \sum_{\alpha_1=0}^p \frac{(-1)^{\beta_1}}{\beta_1!} h_{\alpha_1+\beta_1}(\dots) \underbrace{\sum_{\alpha_2=0}^p \frac{(-1)^{\beta_2}}{\beta_2!} A_{\alpha_1, \alpha_2} h_{\alpha_2+\beta_2}(\dots)}_{=:\lambda_{\alpha_1, \beta_2}}.$$

Der Aufwand für die Berechnung des Koeffizienten  $\lambda_{\alpha_1, \beta_2}$  beträgt  $\mathcal{O}((p+1)^3)$  und der Gesamtaufwand für die Berechnung von  $C_\beta$  ist dann  $\mathcal{O}(2(p+1)^3)$ .

**Fall  $d = 3$ :** Für  $d = 3$  kann  $C_\beta$  geschrieben werden als

$$C_\beta = \sum_{\alpha_1=0}^p \frac{(-1)^{\beta_1}}{\beta_1!} h_{\alpha_1+\beta_1}(\dots) \underbrace{\sum_{\alpha_2=0}^p \frac{(-1)^{\beta_2}}{\beta_2!} h_{\alpha_2+\beta_2}(\dots) \underbrace{\sum_{\alpha_3=0}^p \frac{(-1)^{\beta_3}}{\beta_3!} h_{\alpha_3+\beta_3}(\dots) A_{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3}}_{=:\lambda_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_3}}}_{=:\lambda_{\alpha_1, \beta_2, \beta_3}}.$$

Die Koeffizienten  $\lambda_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_3}$  und  $\lambda_{\alpha_1, \beta_2, \beta_3}$  hängen jeweils von 3 Indizes ab, und es muss bei ihrer Berechnung über einen vierten Index summiert werden. Somit ergibt sich jeweils ein Rechenaufwand von  $\mathcal{O}((p+1)^4)$ , womit sich ein Gesamtaufwand für die Berechnung von  $\lambda_{\alpha_1, \alpha_2, \beta_3}$ ,  $\lambda_{\alpha_1, \beta_2, \beta_3}$  und  $C_\beta$  von  $\mathcal{O}(3(p+1)^4)$  ergibt.

**Allgemeine Dimension:** Für eine allgemeine Dimension  $d$  erhält man, durch analoge Aufspaltung der Summe über  $\alpha$ , somit  $d - 1$  Koeffizienten  $\lambda_{\alpha_1, \dots, \alpha_{d-1}, \beta_d}$  bis  $\lambda_{\alpha_1, \beta_2, \dots, \beta_d}$ , deren Berechnung jeweils  $\mathcal{O}((p+1)^{d+1})$  Operationen benötigt, was zu einem Gesamtaufwand für die Berechnung der Koeffizienten  $C_\beta$  von  $\mathcal{O}(d(p+1)^{d+1})$  führt.

Da die Koeffizienten für jede Box berechnet werden müssen, und immer  $(2n+1)^d$  Nahfeldboxen berücksichtigt werden, ist der Gesamtaufwand bei einer Hermite- und Taylor-Entwicklung somit

$$\mathcal{O}((p+1)^d N) + \mathcal{O}((2n+1)^d d(p+1)^{d+1} N_{Box}) + \mathcal{O}((p+1)^d M).$$

Da es bei der Aufstellung einer Reihenentwicklung für eine Box passieren kann, dass die Anzahl der Punkte in dieser Box sehr gering ist im Vergleich zum verwendeten Entwicklungsgrad  $p$ , kann man in diesem Fall auf eine Reihenentwicklung verzichten und die Punkte direkt auswerten. Man führt dazu zwei neue Parameter  $N_F$  und  $M_L$  für die Quell- und Zielboxen ein, und führt die entsprechende Reihenentwicklung nur aus, falls die gegebene Schranke überschritten wird.

### 3.2.3 Algorithmus

Zu gegebenen Punkten  $s_j, t_i \in B_0 = [0, 1]^d$  und Gewichten  $q_j \in \mathbb{R}$  mit  $j = 1, \dots, N$ ,  $i = 1, \dots, M$  und Skalierungsfaktor  $\delta > 0$ , müssen die Parameter  $r$ ,  $n$  und  $p$ , wie in Abschnitt 3.2.1 beschrieben, gewählt werden, um eine gewünschte Genauigkeit  $\varepsilon$  zu erreichen. Außerdem können Parameter  $N_F$  und  $M_L$  gewählt werden, die eine Mindestanzahl an Punkten pro Box angeben, ab der eine Reihenentwicklung angewandt wird.

Zunächst muss  $B_0$  in durch den Parameter  $r$  beschriebene Boxen unterteilt werden. Dies geschieht durch Halbierung der Kantenlänge, bis die gewünschte Länge erreicht ist.

Als nächstes werden in einer Schleife über alle Boxen die Koeffizienten der Reihenentwicklungen berechnet. Wegen der Symmetrie des Algorithmus ist es egal, ob die Schleife über die Quell– oder Zielboxen läuft. Es hat nur einen Einfluss darauf, welche Entwicklungskoeffizienten zwischengespeichert werden müssen. Da die äußere Schleife über die Quellboxen läuft müssen die Koeffizienten  $C_\beta$  der Taylor–Entwicklung zwischengespeichert werden.

Nach der Berechnung der Koeffizienten muss in allen Zielboxen, in denen eine Taylor–Entwicklung angewandt wurde, diese noch ausgewertet und zum Funktionswert der diskreten Gauß–Transformation in den entsprechenden Punkten addiert werden.

Im folgenden Algorithmus 2 wird die aktuelle Quellbox mit  $B_k$  bezeichnet, und die Anzahl der in ihr enthaltenen Quellen ist  $N_{B_k}$ . Analog wird die aktuelle Zielbox mit  $C_\ell$  und die Anzahl der Punkte mit  $M_{C_\ell}$  bezeichnet. Die Abhängigkeit der Koeffizienten der Taylor–Entwicklung  $C_\beta$  von der aktuellen Box  $C_\ell$  wird durch die Schreibweise  $C_\beta(C_\ell)$  verdeutlicht.

**Bemerkung 3.9.** *Die in Algorithmus 2 angegebenen Formeln für Koeffizienten und Reihenentwicklungen unterscheiden sich von den in Abschnitt 3.1.3 angegebenen Formeln. Das liegt daran, dass mit*

$$h_\beta(s - t) = (-1)^{|\beta|} h_\beta(t - s), \quad s, t \in \mathbb{R}^d, \beta \in \mathbb{N}_0^d$$

und

$$(s - t)^\alpha = (-1)^{|\alpha|} (t - s)^\alpha, \quad s, t \in \mathbb{R}^d, \alpha \in \mathbb{N}_0^d$$

die Reihenentwicklungen so umgeschrieben wurden, dass für die Koeffizienten  $A_\alpha$  und  $C_\beta$  keine Faktoren der Form  $(-1)^{|\alpha|}$  bzw.  $(-1)^{|\beta|}$  auftreten.

**Algorithmus 2** FGT mit Hermite- und Taylor-Entwicklung

---

```

for  $k = 1, N_{Box}$  do                                ▷ Schleife über alle Quellboxen
  if  $N_{B_k} < N_F$  then                                ▷ direkter Beitrag der  $N_{B_k}$  Quellen
    for  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  do                        ▷ Schleife über Nahfeldboxen
      if  $M_{C_\ell} < M_L$  then                        ▷ direkte Auswertung von (2.1) für die  $N_{B_k}$  Quellen
        
$$G(t_i) += \sum_{j=1}^{N_{B_k}} q_j e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta}, \quad i = 1, M_{C_\ell}$$

      else                                            ▷ Berechnung der Taylor-Koeffizienten (3.18) für  $N_{B_k}$  Quellen
        
$$C_\beta(C_\ell) += \frac{1}{\beta!} \sum_{j=1}^{N_{B_k}} q_j h_\beta \left( \frac{s_j - t_{C_\ell}}{\sqrt{\delta}} \right), \quad \forall \beta \leq p$$

      end if
    end for
  else                                            ▷ Berechnung der Hermite-Koeffizienten (3.13) für  $N_{B_k}$  Quellen
    
$$A_\alpha = \frac{1}{\alpha!} \sum_{j=1}^{N_{B_k}} q_j \left( \frac{s_{B_k} - s_j}{\sqrt{\delta}} \right)^\alpha, \quad \forall \alpha \leq p$$

    for  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  do                        ▷ Schleife über Nahfeldboxen
      if  $M_{C_\ell} < M_L$  then                        ▷ direkte Auswertung der Hermite-Entwicklung (3.14)
        
$$G(t_i) += \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_\alpha \left( \frac{s_{B_k} - t_i}{\sqrt{\delta}} \right), \quad i = 1, M_{C_\ell}$$

      else ▷ Berechnung der Taylor-Koeffizienten (3.20) der Hermite-Entwicklung
        
$$C_\beta(C_\ell) += \frac{1}{\beta!} \sum_{\alpha \leq p} A_\alpha h_{\alpha+\beta} \left( \frac{s_{B_k} - t_{C_\ell}}{\sqrt{\delta}} \right), \quad \forall \beta \leq p$$

      end if
    end for
  end if
end for
for  $\ell = 1, N_{Box}$  do                                ▷ Schleife über alle Zielboxen
  if  $M_{C_\ell} \geq M_L$  then                        ▷ Auswertung der Taylor-Entwicklung (3.17) bzw. (3.21)
    
$$G(t_i) += \sum_{\beta \leq p} C_\beta(C_\ell) \left( \frac{t_i - t_{C_\ell}}{\sqrt{\delta}} \right)^\beta, \quad i = 1, M_{C_\ell}$$

  end if
end for

```

---



# 4 Schnelle Gauß–Transformation mit Chebyshev–Entwicklung

Neben der in Kapitel 3 beschriebenen Approximation einer Gauß–Funktion durch Hermite– und Taylor–Entwicklungen besteht auch die Möglichkeit, eine Reihenentwicklung mittels Chebyshev–Polynomen zu machen. Erstmals beschrieben wurde diese Methode 2009 von J. Tausch und A. Weckiewicz [19]. Die wesentlichen Unterschiede der neuen Methode sind, dass auf eine Unterteilung des Gebietes verzichtet wurde, und ein anderes Abbruchkriterium der Reihenentwicklungen angewandt wurde. Anwendungen der Chebyshev–Entwicklung finden sich in Arbeiten zur Lösung von parabolischen Randintegralgleichungen von J. Tausch [18] und M. Messner [12].

## 4.1 Reihenentwicklung und Fehlerabschätzungen

Im ersten Teil dieses Abschnittes werden einige Grundlegende Definitionen und Eigenschaften der Chebyshev–Polynome angegeben. Danach werden die für den Algorithmus benötigten Reihenentwicklungen eingeführt und entsprechende Fehlerabschätzungen angegeben.

**Definition 4.1** ([11]). *Die Chebyshev–Polynome sind definiert durch*

$$T_n(x) = \cos(n \cdot \arccos(x)), \quad x \in [-1, 1], n \in \mathbb{N}_0.$$

Eine effiziente Berechnung der Chebyshev–Polynome ist durch folgende Rekursionsformel möglich.

**Satz 4.2** ([11]). *Die Chebyshev–Polynome erfüllen die Rekursionsformel*

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), \quad x \in [-1, 1], n \in \mathbb{N}$$

mit

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x.$$

Für die Approximation mittels Chebyshev–Polynomen werden folgende Orthogonalitätsbeziehungen ausgenützt.

**Satz 4.3** ([11]). *Die Chebyshev–Polynome  $T_n(x)$  erfüllen die  $L_w^2(-1, 1)$ –Orthogonalität mit Gewichtsfunktion  $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$*

$$\int_{-1}^1 T_n(x)T_m(x)w(x) dx = \frac{\pi}{\gamma_n} \delta_{nm}, \quad \gamma_n = \begin{cases} 1, & n = 0 \\ 2, & n > 0. \end{cases}$$

**Satz 4.4** ([11]). *Die Chebyshev–Polynome erfüllen die diskrete Orthogonalität*

$$\sum_{i=0}^p T_n(\omega_i^p) T_m(\omega_i^p) = \frac{p+1}{\gamma_n} \delta_{nm}, \quad (4.1)$$

wobei  $\omega_i^p$  die Nullstellen von  $T_{p+1}$  sind:

$$\omega_i^p = \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{2i+1}{p+1}\right), \quad i = 0, \dots, p.$$

**Approximation für  $x \in [-1, 1]$**

Für die Approximationen mit Chebyshev–Polynomen werden zwei Möglichkeiten betrachtet, einerseits durch Ausnützung der  $L_w^2(-1, 1)$ –Orthogonalität, und andererseits durch Interpolation.

**Satz 4.5.** *Die Koeffizienten der  $L_w^2(-1, 1)$ –Projektion mit  $w(x) = (1-x^2)^{-1/2}$*

$$\mathcal{S}_p f(x) = \sum_{k=0}^p f_k T_k(x), \quad x \in [-1, 1], \quad (4.2)$$

einer stetigen Funktion  $f \in \mathcal{C}[-1, 1]$  sind gegeben durch

$$f_k = \frac{\gamma_k}{\pi} \int_{-1}^1 f(x) T_k(x) w(x) dx.$$

*Beweis.* Die Darstellung der Koeffizienten folgt direkt aus der  $L_w^2(-1, 1)$ –Orthogonalität der Chebyshev–Polynome nach Satz 4.3, und nach [15, Folgerung 12.35] konvergiert  $\mathcal{S}_p f$  gleichmäßig auf  $[-1, 1]$  gegen  $f$ .  $\square$

**Satz 4.6.** *Bei der Interpolation einer stetigen Funktion  $f \in \mathcal{C}[-1, 1]$  mit Chebyshev–Stützstellen  $\{\omega_i^p\}_{i=0}^p$*

$$\mathcal{I}_p f(x) = \sum_{k=0}^p c_k T_k(x), \quad x \in [-1, 1]$$

gilt für die Koeffizienten

$$c_k = \frac{\gamma_k}{p+1} \sum_{i=0}^p f(\omega_i^p) T_k(\omega_i^p).$$

*Beweis.* Mit  $x = \omega_i^p$  und durch Ausnützung der diskreten Orthogonalität (4.1) erhält man

$$\begin{aligned}
 f(\omega_i^p) &= \sum_{k=0}^p c_k T_k(\omega_i^p) && | \cdot T_j(\omega_i^p) \\
 f(\omega_i^p) T_j(\omega_i^p) &= \sum_{k=0}^p c_k T_k(\omega_i^p) T_j(\omega_i^p) && \left| \sum_{i=0}^p \right. \\
 \sum_{i=0}^p f(\omega_i^p) T_j(\omega_i^p) &= \sum_{k=0}^p c_k \underbrace{\sum_{i=0}^p T_k(\omega_i^p) T_j(\omega_i^p)}_{=\frac{p+1}{\gamma_j} \delta_{kj}} \\
 \sum_{i=0}^p f(\omega_i^p) T_j(\omega_i^p) &= c_j \frac{p+1}{\gamma_j}.
 \end{aligned}$$

□

### Approximation für $s \in [a, b]$

Da die Chebyshev–Polynome nur auf dem Intervall  $[-1, 1]$  definiert sind, müssen Funktionen, die auf einem allgemeinen Intervall  $[a, b]$  gegeben sind, erst nach  $[-1, 1]$  transformiert werden. Die entsprechende Transformation  $\Phi : [-1, 1] \mapsto [a, b]$  ist gegeben durch

$$s = \Phi(x) = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x.$$

Die Interpolation mit Chebyshev–Polynomen für eine Funktion  $f : [a, b] \mapsto \mathbb{R}$  lautet dann

$$\mathcal{I}_p f(s) = \sum_{k=0}^p c_k T_k(x) = \sum_{k=0}^p c_k T_k(\Phi^{-1}(s))$$

mit Koeffizienten

$$c_k = \frac{\gamma_k}{p+1} \sum_{i=0}^p f(\Phi(\omega_i^p)) T_k(\omega_i^p).$$

Im Folgenden wird die Transformation geschrieben als

$$s = \Phi_B(x) = \underbrace{\frac{a+b}{2}}_{=:s_B} + \underbrace{\frac{b-a}{2}}_{=:h} x = s_B + hx, \quad x \in [-1, 1], \quad (4.3)$$

wobei  $s_B$  wie in Kapitel 3 zur Hermite– und Taylor–Entwicklung dem Zentrum der aktuellen Box  $B$  entspricht, und  $h = \frac{s}{2}$  der halben Kantenlänge.

### 4.1.1 Chebyshev–Entwicklungen in $\mathbb{R}$ und Abschätzungen der Entwicklungskoeffizienten

In diesem Abschnitt wird die Chebyshev–Entwicklung durch die Projektion  $\mathcal{S}_p f$  aus (4.2) auf die Gauß–Funktion

$$\exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right)$$

angewandt. Dabei gibt es 3 mögliche Entwicklungen. Einerseits nach der Variablen  $s$ , die in der diskreten Gauß–Transformation dann den Quellen entspricht, andererseits nach der Variablen  $t$ , die den Zielen entspricht, und außerdem ist eine bivariate Entwicklung nach beiden Variablen möglich. Zur Abschätzung des Gesamtfehlers bei der Approximation der diskreten Gauß–Transformation durch eine abgebrochene Chebyshev–Entwicklung wird es notwendig sein, die Entwicklungskoeffizienten dieser Reihenentwicklungen abzuschätzen. Daher werden in diesem Abschnitt auch entsprechende Abschätzungen angegeben. Abschätzungen der Entwicklungskoeffizienten der bivariaten Chebyshev–Entwicklung wurden bereits in Veröffentlichungen von J. Tausch und A. Weckiewicz [19, Lemma 2.2, Seite 3550] und J. Tausch [18, Lemma 1, Seite 207] angegeben, und zum Beispiel in einer Arbeit von M. Messner [12] verwendet. Die Beweistechnik in der vorliegenden Arbeit richtet sich nach den in diesen Arbeiten angegebenen Beweisen, und konnte auch leicht verbessert werden.

**Satz 4.7** (Chebyshev–Entwicklung für Quellen). *Gegeben sei die Gauß–Funktion*

$$\exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right),$$

wobei die Variable  $s$  in einem Intervall  $B$  mit Mittelpunkt  $s_B$  und halber Kantlänge  $h$  ausgewertet werden soll. Mit der Transformation  $s = \Phi_B(x)$ ,  $x \in [-1, 1]$ , nach Formel (4.3) lautet die eindimensionale Chebyshev–Entwicklung dieser Funktion nach der Variablen  $s$

$$\exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(t) T_n(\Phi_B^{-1}(s)),$$

wobei die Koeffizienten gegeben sind durch

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - x)^2\right) T_n(x) w(x) dx, \quad (4.4)$$

mit  $\Phi_B^{-1}(t) = \frac{t-s_B}{h}$ .

*Beweis.* Mit der Transformation  $s = s_B + hx$  lässt sich die Gauß–Funktion umformen auf

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right) &= \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s_B-hx)^2\right) = \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}\left(\frac{t-s_B}{h}-x\right)^2\right) \\ &= \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t)-x)^2\right). \end{aligned}$$

Die Chebyshev-Entwicklung durch Projektion nach der Variablen  $x \in [-1, 1]$  ist gemäß Satz 4.5 gegeben durch

$$\exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - x)^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(t)T_n(x) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(t)T_n(\Phi_B^{-1}(s)),$$

und die Koeffizienten lauten

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - x)^2\right) T_n(x)w(x) dx.$$

□

Zur Abschätzung der Entwicklungskoeffizienten wird folgende Aussage aus der komplexen Analysis benötigt.

**Lemma 4.8.** Für eine ganze  $2\pi$ -periodische Funktion  $f : \mathbb{C} \mapsto \mathbb{C}$  und  $a > 0$  gilt

$$\int_0^{2\pi} f(x) dx = \int_0^{2\pi} f(x + ia) dx.$$

*Beweis.* Da  $f$  eine ganze Funktion ist, gilt mit dem Cauchyschen Integralsatz [14, Theorem 10.14] für das Integral über die in Abbildung 4.1 dargestellte geschlossene Kurve

$$\oint_{\mathcal{C}} f(z) dz = 0.$$

Für  $z = x + iy \in \mathbb{C}$  lässt sich das Integral auf die 4 Teilstücke aufspalten und mit der

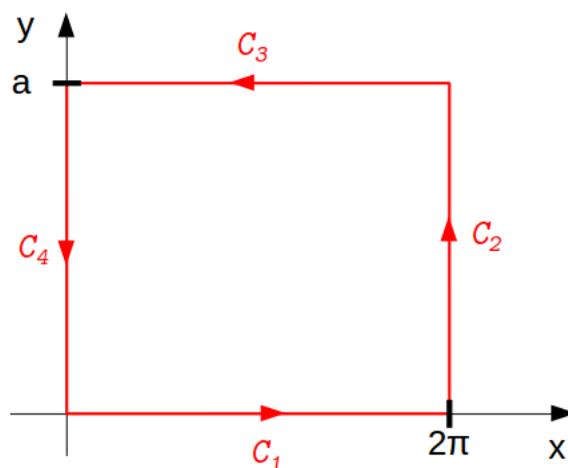


Abbildung 4.1: Geschlossene Kurve  $\mathcal{C} = \mathcal{C}_1 + \mathcal{C}_2 + \mathcal{C}_3 + \mathcal{C}_4$

$2\pi$ –Periodizität von  $f$

$$f(z) = f(z + 2\pi), \quad z \in \mathbb{C}$$

erhält man

$$\begin{aligned} 0 &= \oint_{\mathcal{C}} f(z) dz = \int_0^{2\pi} f(x + i0) dx + i \int_0^a f(2\pi + iy) dy \\ &\quad + \int_{2\pi}^0 f(x + ia) dx + i \int_a^0 f(0 + iy) dy \\ &= \int_0^{2\pi} f(x) dx + i \int_0^a f(iy) dy \\ &\quad - \int_0^{2\pi} f(x + ia) dx - i \int_0^a f(iy) dy. \end{aligned}$$

Wegen der Periodizität von  $f$  fallen die Integrale über  $y$  weg, und man erhält

$$\int_0^{2\pi} f(x) dx = \int_0^{2\pi} f(x + ia) dx.$$

□

**Satz 4.9.** Die Koeffizienten  $E_n(t)$  der Chebyshev–Entwicklung aus Satz 4.7 erfüllen die Ungleichung

$$|E_n(t)| \leq \frac{\gamma_n}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{4\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right),$$

für  $n \in \mathbb{N}_0$ ,  $t \in \mathbb{R}$  und beliebiges  $a > 0$ .

*Beweis.* Nach Satz 4.7 haben die Entwicklungskoeffizienten die Form

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (\Phi_B^{-1}(t) - x)^2\right) T_n(x) w(x) dx.$$

Die Variablensubstitution  $x = \cos \varphi$ ,  $\varphi \in [0, \pi]$  liefert mit der Definition 4.1 der Chebyshev–Polynome und der Gewichtsfunktion  $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2} = \sin^{-1} \varphi$

$$\begin{aligned} E_n(t) &= \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{\pi}^0 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi))^2\right) \cos(n\varphi) \frac{1}{\sin \varphi} (-\sin \varphi) d\varphi \\ &= \frac{\gamma_n}{\pi} \int_0^{\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi))^2\right) \cos(n\varphi) d\varphi. \end{aligned}$$

Da der Integrand symmetrisch um  $\varphi = \pi$  ist, kann man die obere Integralgrenze auf  $2\pi$  erhöhen und erhält damit den doppelten Wert des Integrals:

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi))^2\right) \cos(n\varphi) d\varphi.$$

Wegen der Symmetrie des Exponentialfunktionsterms im Integranden um  $\varphi = \pi$ , fällt bei der Substitution

$$\cos(n\varphi) = \exp(in\varphi) - i \sin(n\varphi)$$

das Integral über den Sinusterm weg, und man erhält

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi))^2\right) \exp(in\varphi) d\varphi.$$

Der Integrand dieses Integrals ist eine ganze,  $2\pi$ -periodische Funktion, somit lässt sich Lemma 4.8 anwenden und der Integrand durch  $\varphi \mapsto \varphi + i\tilde{a}$  in die komplexe Ebene verschieben, ohne den Wert des Integrals zu ändern. Man erhält mit  $a = \exp(\tilde{a})$

$$\begin{aligned} E_n(t) &= \frac{\gamma_n}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi + i\tilde{a}))^2\right) \exp(in(\varphi + i\tilde{a})) d\varphi \\ &= \frac{\gamma_n}{2\pi} \frac{1}{a^n} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi + i\tilde{a}))^2\right) \exp(in\varphi) d\varphi. \end{aligned}$$

Wegen  $|e^z| = |e^{\operatorname{Re}(z)}|$  genügt es, den Realteil des Integranden abzuschätzen. Mit

$$\cos(u + iv) = \cos(u) \cosh(v) - i \sin(u) \sinh(v)$$

erhält man

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}((\Phi_B^{-1}(t) - \cos(\varphi + i\tilde{a}))^2) &= \operatorname{Re}((\Phi_B^{-1}(t) - \cos \varphi \cdot \cosh \tilde{a} + i \sin \varphi \cdot \sinh \tilde{a})^2) \\ &= \underbrace{(\Phi_B^{-1}(t) - \cos \varphi \cdot \cosh \tilde{a})^2}_{\geq 0} - \underbrace{\sin^2 \varphi \cdot \sinh^2 \tilde{a}}_{\leq 1} \\ &\geq -\sinh^2 \tilde{a} = -\left(\frac{e^{\tilde{a}} - e^{-\tilde{a}}}{2}\right)^2 = -\frac{1}{4} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2, \end{aligned}$$

mit  $a = e^{\tilde{a}}$ . Damit folgt die gewünschte Abschätzung

$$|E_n(t)| \leq \frac{\gamma_n}{2\pi} \frac{1}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \frac{1}{4} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right) 2\pi = \frac{\gamma_n}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{4\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

□

Analog zu Satz 4.7 ist es auch möglich, eine Chebyshev-Entwicklung in der zweiten Variablen  $t$  aufzustellen.

**Satz 4.10** (Chebyshev-Entwicklung für Ziele). *Die eindimensionale Chebyshev-Entwicklung einer Gauß-Funktion nach der Variablen  $t \in C$ , wobei  $C \subset \mathbb{R}$  ein beliebiges Intervall ist, lautet*

$$\exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(s) T_n(\Phi_C^{-1}(t)),$$

wobei die Koeffizienten gegeben sind durch

$$E_n(s) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(y - \Phi_C^{-1}(s))^2\right) T_n(y) w(y) dy. \quad (4.5)$$

*Beweis.* Mit der Transformation  $t = \Phi_C(y) = t_C + hy$ ,  $y \in [-1, 1]$ , lässt sich die Gauß–Funktion umformen auf

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t - s)^2\right) &= \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t_C + hy - s)^2\right) = \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}\left(\frac{t_C - s}{h} + y\right)^2\right) \\ &= \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(y - \Phi_C^{-1}(s))^2\right). \end{aligned}$$

Nach Satz 4.5 ist dann die Chebyshev–Entwicklung in  $y$  gegeben durch

$$\exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(y - \Phi_C^{-1}(s))^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(s) T_n(y) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n(s) T_n(\Phi_C^{-1}(t)),$$

mit

$$E_n(s) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(y - \Phi_C^{-1}(s))^2\right) T_n(y) w(y) dy.$$

□

Bei der Chebyshev–Entwicklung nach der zweiten Variablen lassen sich die Entwicklungskoeffizienten gleich wie in Satz 4.9 abschätzen.

**Satz 4.11.** Die Koeffizienten  $E_n(s)$  der Chebyshev–Entwicklung aus Satz 4.10 erfüllen die Ungleichung

$$|E_n(s)| \leq \frac{\gamma_n}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{4\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right),$$

für  $n \in \mathbb{N}_0$ ,  $t \in \mathbb{R}$  und beliebiges  $a > 0$ .

*Beweis.* Durch die Substitution  $y = \cos \vartheta$ ,  $\vartheta \in [0, \pi]$  und analoge Umformungen wie im Beweis zu Satz 4.9 erhält man für  $E_n(s)$  den Ausdruck

$$E_n(s) = \frac{\gamma_n}{2\pi} \frac{1}{a^n} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(\cos(\vartheta + i\tilde{a}) - \Phi_C^{-1}(s))^2\right) \exp(in\vartheta) d\vartheta,$$

der sich nur im Vorzeichen des Cosinus–Terms unterscheidet. Hier gilt für den Realteil des Integranden

$$\begin{aligned} \operatorname{Re}((\cos(\vartheta + i\tilde{a}) - \Phi_C^{-1}(s))^2) &= \operatorname{Re}((\cos \vartheta \cdot \cosh \tilde{a} - i \sin \vartheta \cdot \sinh \tilde{a} - \Phi_C^{-1}(s))^2) \\ &= \underbrace{(\cos \vartheta \cdot \cosh \tilde{a} - \Phi_C^{-1}(s))^2}_{\geq 0} - \underbrace{\sin^2 \vartheta \cdot \sinh^2 \tilde{a}}_{\leq 1} \\ &\geq -\sinh^2 \tilde{a} = -\left(\frac{e^{\tilde{a}} - e^{-\tilde{a}}}{2}\right)^2 = -\frac{1}{4} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2, \end{aligned}$$

und man kommt zur selben Abschätzung

$$|E_n(s)| \leq \frac{\gamma_n}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{4\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

□

Die obigen beiden Reihenentwicklungen lassen sich auch kombinieren, was zu einer bivariaten Chebyshev–Entwicklung führt, bei der die Entwicklungskoeffizienten unabhängig von den Variablen  $s$  und  $t$  sind. Diese Reihenentwicklung entspricht nun der von J. Tausch und A. Weckiewicz [19] betrachteten Entwicklung, die dann noch ins Mehrdimensionale übertragen wird.

**Satz 4.12** (Chebyshev–Entwicklung für Quellen und Ziele). *Eine eindimensionale Chebyshev–Entwicklung der Gauß–Funktion für Quellen  $s \in B$  mit Zentrum  $s_B$  und Ziele  $t \in C$  mit Zentrum  $t_C$  lautet*

$$\exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right) = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} E_{k,\ell} T_k(\Phi_B^{-1}(s)) T_\ell(\Phi_C^{-1}(t)),$$

wobei die Koeffizienten gegeben sind durch

$$E_{k,\ell} = \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{\pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) T_k(x) T_\ell(y) w(x) w(y) dx dy, \quad (4.6)$$

mit  $d = \frac{t_C - s_B}{h}$ .

*Beweis.* Mit  $s = \Phi_B(x) = s_B + hx$  und  $t = \Phi_C(y) = t_C + hy$ ,  $x, y \in [-1, 1]$ , lässt sich die Gauß–Funktion umformen auf

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t-s)^2\right) &= \exp\left(-\frac{1}{\delta}(t_C + hy - s_B - hx)^2\right) = \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} \left(\frac{t_C - s_B}{h} + y - x\right)^2\right) \\ &= \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right), \end{aligned}$$

mit  $d = \frac{t_C - s_B}{h}$ . Stellt man nun hier wie in Satz 4.7 eine Chebyshev–Entwicklung nach der Variablen  $x$  auf, erhält man

$$\exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) = \sum_{k=0}^{\infty} \tilde{E}_k(y) T_k(x),$$

mit Koeffizienten

$$\tilde{E}_k(y) = \frac{\gamma_k}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) T_k(x) w(x) dx,$$

entsprechend Satz 4.7. Wird nun weiters eine Chebyshev–Entwicklung nach der Variablen  $y$ , wie in Satz 4.10 angewandt, erhält man die bivariate Chebyshev–Entwicklung

$$\exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} E_{k,\ell} T_k(x) T_\ell(y) = \sum_{k,\ell=0}^{\infty} E_{k,\ell} T_k(\Phi_B^{-1}(s)) T_\ell(\Phi_C^{-1}(t)),$$

mit Koeffizienten

$$E_{k,\ell} = \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{\pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) T_k(x) T_\ell(y) w(x) w(y) dx dy.$$

□

Auch für die bivariate Reihenentwicklung lässt sich eine ähnliche Abschätzung der Koeffizienten angeben wie in den Sätzen 4.9 und 4.11.

**Satz 4.13.** *Die Entwicklungskoeffizienten der bivariaten Chebyshev–Entwicklung aus Satz 4.12 erfüllen die Ungleichung*

$$|E_{k,\ell}| \leq \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right),$$

mit  $n = k + \ell$  und beliebigem  $a > 0$ .

*Beweis.* Die Abschätzung der Koeffizienten erfolgt analog zu den bisherigen Fällen in den Beweisen der Sätze 4.9 und 4.11, und mit den Substitutionen  $x = \cos(\vartheta)$ ,  $y = \cos(\vartheta)$  und  $n = k + \ell$  erhält man

$$E_{k,\ell} = \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{(2\pi)^2} \frac{1}{a^n} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d + \cos(\vartheta + i\tilde{a}) - \cos(\varphi + i\tilde{a}))^2\right) \exp(i(k\vartheta + \ell\varphi)) d\varphi d\vartheta.$$

Hier ergibt sich als Abschätzung des Realteiles

$$\begin{aligned} & \operatorname{Re}\left((d + \cos(\vartheta + i\tilde{a}) - \cos(\varphi + i\tilde{a}))^2\right) \\ &= \operatorname{Re}\left((d + \cos \vartheta \cdot \cosh \tilde{a} - \cos \varphi \cdot \cosh \tilde{a} - i[\sin \vartheta \cdot \sinh \tilde{a} - \sin \varphi \cdot \sinh \tilde{a}])^2\right) \\ &= \underbrace{(d + \cos \vartheta \cdot \cosh \tilde{a} - \cos \varphi \cdot \cosh \tilde{a})^2}_{\geq 0} - \underbrace{[\sin \vartheta - \sin \varphi]^2}_{\leq 4} \cdot \sinh^2 \tilde{a} \\ &\geq -4 \sinh^2 \tilde{a} = -4 \left(\frac{e^{\tilde{a}} - e^{-\tilde{a}}}{2}\right)^2 = -\left(a - \frac{1}{a}\right)^2, \end{aligned}$$

und man erhält insgesamt

$$|E_{k,\ell}| \leq \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

□

**Bemerkung 4.1.** Mit  $|\gamma_k \gamma_\ell| \leq 4$  liefert die Abschätzung aus Satz 4.13

$$|E_{k,\ell}| \leq \frac{4}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

In der Arbeit von M. Messner [12, Beweis Lemma 4.4] wird eine ähnliche Abschätzung, die sich auch auf die Abschätzung von J. Tausch [18, Lemma 1] bezieht, angegeben

$$|E_{k,\ell}| \leq \frac{4}{a^n} \exp\left(\frac{s^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right),$$

mit Kantenlänge der Box  $s = 2h$ ,  $n = k + \ell$  und beliebigem  $a > 1$ . Ersetzt man in dieser Abschätzung die Kantenlänge  $s$  durch die in Satz 4.12 verwendete halbe Kantenlänge  $h = \frac{s}{2}$ , ergibt sich ein zusätzlicher Faktor 4 im Argument der Exponentialfunktion. Wegen dieses zusätzlichen Faktors, zu dem es durch eine fehlerhafte Umformung eines Sinus hyperbolicus Terms kam, stellt die in der vorliegenden Arbeit angegebene Abschätzung somit eine leichte Verbesserung dar.

#### 4.1.2 Chebyshev–Entwicklung im $\mathbb{R}^d$ und Abschätzungen des Gesamtfehlers

In diesem Abschnitt werden die zuvor eingeführten eindimensionalen Chebyshev–Entwicklungen auf die diskrete Gauß–Transformation im  $\mathbb{R}^d$  angewandt. Wie bei der mehrdimensionalen Hermite– und Taylor–Entwicklung in Abschnitt 3.1.2 wird auch hier wieder die Multiindex–Notation verwendet, um die dabei auftretenden Entwicklungskoeffizienten zu beschreiben. Die mehrdimensionale Gauß–Funktion, mit  $s, t \in \mathbb{R}^d$  und  $0 < \delta \in \mathbb{R}$ , lässt sich als Produkt von eindimensionalen Gauß–Funktionen schreiben

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\delta}|t-s|^2\right) &= \exp\left(-\frac{(t_1-s_1)^2 + \cdots + (t_d-s_d)^2}{\delta}\right) \\ &= \exp\left(-\frac{(t_1-s_1)^2}{\delta}\right) \cdots \exp\left(-\frac{(t_d-s_d)^2}{\delta}\right), \end{aligned}$$

auf die dann jeweils die im vorigen Abschnitt eingeführten Entwicklungen angewandt werden können. Als Beispiel für eine mehrdimensionale Chebyshev–Entwicklung nach der Variablen  $s \in \mathbb{R}^d$  erhält man nach Satz 4.7

$$\begin{aligned} \exp\left(-\frac{1}{\delta}|t-s|^2\right) &= \exp\left(-\frac{(t_1-s_1)^2}{\delta}\right) \cdots \exp\left(-\frac{(t_d-s_d)^2}{\delta}\right) \\ &= \left(\sum_{\alpha_1=0}^{\infty} E_{\alpha_1}(t_1) T_{\alpha_1}(\Phi_B^{-1}(s_1))\right) \cdots \left(\sum_{\alpha_d=0}^{\infty} E_{\alpha_d}(t_d) T_{\alpha_d}(\Phi_B^{-1}(s_d))\right) \\ &= \sum_{\alpha \geq 0} E_{\alpha}(t) T_{\alpha}(\Phi_B^{-1}(s)), \end{aligned}$$

wobei sich die mehrdimensionalen Koeffizienten  $E_\alpha$  und die Chebyshev–Polynome  $T_\alpha$  aus dem Produkt der eindimensionalen Koeffizienten ergeben als

$$\begin{aligned} E_\alpha(t) &= E_{\alpha_1}(t_1) \cdots E_{\alpha_d}(t_d) \\ T_\alpha(s) &= T_{\alpha_1}(s_1) \cdots T_{\alpha_d}(s_d), \end{aligned}$$

mit Multiindex  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_d) \in \mathbb{N}_0^d$ . Auch die Transformation  $\Phi_B : [-1, 1]^d \mapsto B \subset \mathbb{R}^d$  ist komponentenweise zu verstehen. Die Fehlerabschätzungen werden für den Fall  $d = 2$  angegeben. Es wird dabei notwendig sein, die Anzahl der Summanden in einer Summe der Form  $\sum_{|\alpha+\beta|=n}$  mit Multiindizes  $\alpha$  und  $\beta$  anzugeben. Die dafür benötigte Aussage aus der Kombinatorik liefert das folgende Lemma.

**Lemma 4.14.** *Für die Anzahl der möglichen Multiindizes  $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$  mit  $|\alpha| = n$  gilt*

$$|\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| = n\}| = \binom{n+d-1}{n}.$$

*Beweis.* Zu berechnen ist die Anzahl der  $n$  elementigen Multimengen einer  $d$  elementigen Menge. Das entspricht der Anzahl der Möglichkeiten, aus  $d$  Elementen  $n$  Stück mit Zurücklegen auszuwählen. Sei eine Menge mit  $d$  Elementen

$$\{a_1, \dots, a_d\},$$

mit Häufigkeiten  $x_i$  zu Element  $a_i$  gegeben, dann gilt

$$x_1 + \cdots + x_d = n, \quad x_i \geq 0.$$

Setzt man  $y_i = x_i + 1$ , erhält man

$$y_1 + \cdots + y_d = n + d, \quad y_i \geq 1.$$

Gesucht ist die Anzahl der ganzzahligen Lösungen für  $y_i$ , die diese Bedingungen erfüllen. Betrachtet man dazu  $n + d$  Bälle in einer Reihe, dann entspricht die gesuchte Zahl der Anzahl der Möglichkeiten, wie diese Bälle getrennt werden können:

$$\underbrace{\bullet\bullet}_{\cong a_1} \mid \underbrace{\bullet\bullet\bullet}_{\cong a_2} \mid \bullet \cdots \bullet$$

Die Anzahl der Möglichkeiten  $d - 1$  Trennstriche zu setzen ist

$$\binom{n+d-1}{d-1} = \binom{n+d-1}{n}.$$

□

Um in weiterer Folge auch den Rechenaufwand einer Chebyshev–Entwicklung anzugeben, wird folgendes Korollar benötigt.

**Korollar 4.15.** Für die Anzahl der möglichen Multiindizes  $\alpha \in \mathbb{N}_0^d$  mit  $|\alpha| \leq n$  gilt

$$|\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| \leq n\}| = \binom{n+d}{d}$$

*Beweis.* Um die Kardinalität der angegebenen Menge zu bestimmen, ist folgende Summe zu berechnen:

$$|\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| \leq n\}| = \sum_{k=0}^n |\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| = k\}|.$$

Durch Anwendung von Lemma 4.14 erhält man nun

$$|\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| \leq n\}| = \sum_{k=0}^n \binom{k+d-1}{d-1}.$$

Für die Summation über Binomialkoeffizienten gilt folgende Rechenregel [2, S. 14]

$$\sum_{m=0}^n \binom{m}{k} = \sum_{m=k}^n \binom{m}{k} = \binom{n+1}{k+1}, \quad n, k \in \mathbb{N}_0,$$

womit sich die zuvor angegebene Summe bestimmen lässt, und man erhält

$$|\{\alpha \in \mathbb{N}_0^d : |\alpha| \leq n\}| = \sum_{k=0}^n \binom{k+d-1}{d-1} = \binom{n+d}{d}.$$

□

In der ursprünglichen Veröffentlichung von J. Tausch und A. Weckiewicz [19] wurde der Fehler nur in der durch die Gewichtsfunktion  $w$  definierten  $L_w^2$ -Norm angegeben. Abschätzungen des absoluten Fehlers wurden in späteren Arbeiten von J. Tausch [18, Seite 209] und M. Messner [12, Korollar 4.1] angegeben, und die Abschätzungen der vorliegenden Arbeit richten sich nach diesen Arbeiten.

**Satz 4.16** (Chebyshev-Entwicklung der diskreten Gauß-Transformation für Quellen). Gegeben seien Quellen  $s_j \in \mathbb{R}^2$  mit Gewichten  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N_B$ , die in einem Quadrat  $B \subset \mathbb{R}^2$  mit Zentrum  $s_B$  und Kantenlänge  $2h$  liegen. Dann lautet die Chebyshev-Entwicklung der diskreten Gauß-Transformation (2.1) nach der Variablen  $s$

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{j=1}^{N_B} q_j \sum_{\alpha \geq 0} E_\alpha(t) T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)),$$

wobei sich die mehrdimensionalen Koeffizienten aus dem Produkt der eindimensionalen Koeffizienten nach Gleichung (4.4) zusammensetzen. Werden für die Approximation nur die Terme mit  $|\alpha| \leq p$  berücksichtigt, also

$$G(t) = \sum_{n=0}^p \sum_{|\alpha|=n} E_\alpha(t) \sum_{j=1}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) + E_{CS}(p), \quad (4.7)$$

dann gelten für den Reihenrest  $E_{CS}(p)$  die Abschätzungen

$$|E_{CS}(p)| \leq QC(h, \delta, a)(p+2) \frac{1}{a^{p-1}(a-1)^2} \quad (4.8)$$

$$\leq QC(h, \delta, a)(p+2) \left( \frac{1}{a-1} \right)^{p+1} \quad (4.9)$$

für beliebiges  $a > 1$  und mit  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$  und

$$C(h, \delta, a) = 4 \exp \left( \frac{h^2}{2\delta} \left( a - \frac{1}{a} \right)^2 \right).$$

*Beweis.* Wie zu Beginn des Abschnittes bereits erwähnt, lässt sich die mehrdimensionale Gauß–Funktion als ein Produkt von eindimensionalen Gauß–Funktionen schreiben. Durch Anwendung von Satz 4.7 auf diese eindimensionalen Gauß–Funktionen erhält man als Reihenentwicklung der diskreten Gauß–Transformation

$$\begin{aligned} G(t) &= \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{j=1}^{N_B} q_j \sum_{\alpha \geq 0} E_\alpha(t) T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} E_\alpha(t) \sum_{j=1}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)). \end{aligned}$$

Werden nur die Terme mit  $|\alpha| \leq p$  berücksichtigt, erhält man (4.7), und der Reihenrest lautet

$$E_{CS}(p) = \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} E_\alpha(t) \sum_{j=1}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)).$$

Für die Abschätzung dieses Reihenrestes genügt es, wegen

$$\begin{aligned} |E_{CS}(p)| &\leq \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} |E_\alpha(t)| \underbrace{\sum_{j=1}^{N_B} |q_j|}_{=Q} \underbrace{|T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j))|}_{\leq 1} \\ &\leq Q \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} |E_\alpha(t)| = Q \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} |E_{\alpha_1}(t)| |E_{\alpha_2}(t)| \end{aligned}$$

die Summe der Koeffizienten abzuschätzen. Mit der Abschätzung der Koeffizienten aus Satz 4.9

$$|E_\ell(t)| \leq \frac{\gamma_\ell}{a^\ell} \exp \left( \frac{h^2}{4\delta} \left( a - \frac{1}{a} \right)^2 \right)$$

und mit  $|\gamma_\ell| \leq 2$  erhält man

$$\begin{aligned} |E_{CS}(p)| &\leq Q \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} \left[ 2 \exp \left( \frac{h^2}{4\delta} \left( a - \frac{1}{a} \right)^2 \right) \right]^2 \frac{1}{a^n} \\ &= 4 \exp \left( \frac{h^2}{2\delta} \left( a - \frac{1}{a} \right)^2 \right) \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha|=n} \frac{1}{a^n} \\ &= C(h, \delta, a) \sum_{n=p+1}^{\infty} (n+1) \frac{1}{a^n}. \end{aligned}$$

Die Summe lässt sich durch Herausheben von  $\frac{1}{a^{p+1}}$  und Indexverschiebung  $n \mapsto n + p + 1$  umschreiben auf

$$\sum_{n=p+1}^{\infty} (n+1) \frac{1}{a^n} = \frac{1}{a^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1+p+1) \frac{1}{a^n}.$$

Für  $n, p \geq 0$  gilt die Ungleichung

$$n+1+p+1 = (n+1) + 1 \cdot (p+1) \leq (n+1) + (n+1)(p+1) = (n+1)(p+2), \quad (4.10)$$

und mit der Ableitung einer geometrischen Reihe

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+1) \frac{1}{a^n} = \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{a}\right)^2}, \quad a > 1$$

erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{n=p+1}^{\infty} (n+1) \frac{1}{a^n} &= \frac{1}{a^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1+p+1) \frac{1}{a^n} \\ &\leq \frac{1}{a^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(p+2) \frac{1}{a^n} \\ &= \frac{1}{a^{p+1}} \frac{p+2}{\left(1 - \frac{1}{a}\right)^2} = \frac{p+2}{a^{p-1}(a-1)^2}, \end{aligned}$$

womit sich insgesamt die Abschätzung (4.8)

$$|E_{CS}(p)| \leq QC(h, \delta, a)(p+2) \frac{1}{a^{p-1}(a-1)^2}$$

ergibt. Mit

$$(a-1)^b < a^b \Leftrightarrow \frac{1}{a^b} < \frac{1}{(a-1)^b} \quad \text{für } a > 1, x > 0$$

ergibt sich die zusätzliche Abschätzung

$$\frac{1}{a^{p-1}(a-1)^2} \leq \frac{1}{(a-1)^{p+1}},$$

womit man (4.9) erhält. □

**Bemerkung 4.2.** In den Arbeiten von J. Tausch [18, Seite 208] und M. Messner [12, Lemma 4.4] wird nur die etwas großzügigere Abschätzung des Reihenrestes (4.9) mit dem  $(\frac{1}{a-1})^{p+1}$  Term angegeben, daher wird sie hier erwähnt.

**Satz 4.17** (Chebyshev–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation für Ziele). Gegeben seien Quellen  $s_j \in \mathbb{R}^2$  mit Gewichten  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N_B$ , die in einem Quadrat  $B \subset \mathbb{R}^2$  liegen. Dann lautet die Chebyshev–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation (2.1) für  $t$  in einem Quadrat  $C$  mit Zentrum  $t_C$

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{j=1}^{N_B} q_j \sum_{\beta \geq 0} E_\beta(s_j) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)),$$

wobei sich die mehrdimensionalen Koeffizienten aus dem Produkt der eindimensionalen Koeffizienten nach Gleichung (4.5) zusammensetzen. Werden für die Approximation nur die Terme mit  $|\beta| \leq p$  berücksichtigt, also

$$G(t) = \sum_{n=0}^p \sum_{|\beta|=n} \sum_{j=1}^{N_B} q_j E_\beta(s_j) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CT}(p),$$

dann gilt für den Reihenrest  $E_{CT}(p)$  die Abschätzung

$$\begin{aligned} |E_{CT}(p)| &\leq C(h, \delta, a)(p+2) \frac{1}{a^{p-1}(a-1)^2} \\ &\leq C(h, \delta, a)(p+2) \left(\frac{1}{a-1}\right)^{p+1} \end{aligned}$$

für beliebiges  $a > 1$  und mit  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$  und

$$C(h, \delta, a) = 4 \exp\left(\frac{h^2}{2\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

*Beweis.* Analog zum vorigen Satz erhält man durch Anwendung von Satz 4.10 auf die diskrete Gauß–Transformation und Abbruch der Reihe

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{n=0}^p \sum_{\beta=n} \sum_{j=1}^{N_B} q_j E_\beta(s_j) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CT}(p),$$

mit dem Reihenrest

$$E_{CT}(p) = \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\beta|=n} \sum_{j=1}^{N_B} q_j E_\beta(s_j) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)).$$

Analog zu Satz 4.16 lässt sich auch dieser Reihenrest mit Hilfe der Abschätzung der Koeffizienten  $E_\beta$  aus Satz 4.11 abschätzen durch

$$\begin{aligned} |E_{CT}(p)| &\leq QC(h, \delta, a)(p+2) \frac{1}{a^{p-1}(a-1)^2} \\ &\leq QC(h, \delta, a)(p+2) \left(\frac{1}{a-1}\right)^{p+1}. \end{aligned}$$

□

**Satz 4.18** (Chebyshev–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation für Quellen und Ziele). *Gegeben seien die Quellen  $s_j$  mit Gewichten  $q_j$ ,  $j = 1, \dots, N_B$ , die in einem Quadrat  $B \subset \mathbb{R}^2$  mit Zentrum  $s_B$  und Kantenlänge  $s = 2h$  liegen. Dann lautet die bivariate Chebyshev–Entwicklung der diskreten Gauß–Transformation (2.1) für  $t$  in einem Quadrat  $C$  mit Zentrum  $t_C$*

$$G(t) = \sum_{j=1}^{N_B} q_j e^{-|t-s_j|^2/\delta} = \sum_{j=1}^{N_B} q_j \sum_{\alpha \geq 0} \sum_{\beta \geq 0} E_{\alpha,\beta} T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)),$$

wobei sich die mehrdimensionalen Koeffizienten  $E_{\alpha,\beta}$  aus dem Produkt der eindimensionalen Koeffizienten nach Gleichung (4.6) zusammensetzen. Werden für die Approximation nur die Terme mit  $|\alpha + \beta| \leq p$  berücksichtigt, erhält man

$$G(t) = \sum_{n=0}^p \sum_{|\alpha+\beta|=n} E_{\alpha,\beta} \sum_{j=1}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CST}(p).$$

Für den Reihenrest gilt die Abschätzung

$$\begin{aligned} |E_{CST}(p)| &\leq QC(h, \delta, a)(p+2)^3 \frac{1}{a^{p-3}(a-1)^4} \\ &\leq QC(h, \delta, a)(p+2)^3 \left(\frac{1}{a-1}\right)^{p+1}, \end{aligned}$$

für beliebiges  $a > 1$  und mit  $Q = \sum_{j=1}^{N_B} |q_j|$  und

$$C(h, \delta, a) = 16 \exp\left(2 \frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

*Beweis.* Analog zu den vorigen Sätzen genügt es wegen  $|T_i(x)| \leq 1$ , die Summe über die Koeffizienten  $E_{\alpha,\beta}$  abzuschätzen:

$$|E_{CST}(p)| \leq \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha+\beta|=n} |E_{\alpha,\beta}|,$$

mit

$$E_{\alpha,\beta} = E_{\alpha_1,\beta_1} E_{\alpha_2,\beta_2}.$$

Mit der Abschätzung der Koeffizienten aus Satz 4.13

$$|E_{k,\ell}| \leq \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{a^{k+\ell}} \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right)$$

erhält man

$$|E_{CST}(p)| \leq \left[4 \exp\left(\frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right)\right]^2 \sum_{n=p+1}^{\infty} \sum_{|\alpha+\beta|=n} \frac{1}{a^n}.$$

Mit Hilfe von Lemma 4.14 lässt sich die Anzahl der Summanden in der Summe über die Multiindizes  $\alpha$  und  $\beta$  als Binomialkoeffizient angeben, wobei als Raumdimension  $d = 4$  verwendet werden muss, da über zwei zweidimensionale Multiindizes summiert wird. Man erhält somit

$$\begin{aligned} |E_{CST}(p)| &\leq 16 \exp\left(2 \frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right) \sum_{n=p+1}^{\infty} \binom{n+3}{n} \frac{1}{a^n} \\ &= C(s, \delta, a) \sum_{n=p+1}^{\infty} \binom{n+3}{n} \frac{1}{a^n}. \end{aligned}$$

Durch Herausheben von  $1/a^{p+1}$  und Indexverschiebung  $n \mapsto n + p + 1$  erhält man

$$\sum_{n=p+1}^{\infty} \binom{n+3}{n} \frac{1}{a^n} = \frac{1}{a^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+3+p+1}{n+p+1} \frac{1}{a^n},$$

und analog zum eindimensionalen Fall in Gleichung (4.10) lässt sich der Binomialkoeffizient für  $n, p \geq 0$  abschätzen durch

$$\begin{aligned} \binom{n+3+p+1}{n+p+1} &= (n+3+(p+1)) \cdot (n+2+(p+1)) \cdot (n+1+(p+1)) \\ &\leq (n+3)(p+2) \cdot (n+2)(p+2) \cdot (n+1)(p+2) \\ &= (n+3)(n+2)(n+1)(p+2)^3 \\ &= \binom{n+3}{n} (p+2)^3 = \binom{n+3}{3} (p+2)^3. \end{aligned}$$

Außerdem wird die 3. Ableitung einer geometrischen Reihe benötigt

$$\sum_{n=0}^{\infty} (n+3)(n+2)(n+1) \frac{1}{a^n} = \frac{3!}{\left(1 - \frac{1}{a}\right)^4}, \quad a > 1,$$

womit man

$$\begin{aligned} \frac{1}{a^{p+1}} \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+3+p+1}{n+p+1} \frac{1}{a^n} &\leq \frac{1}{a^{p+1}} (p+2)^3 \sum_{n=0}^{\infty} \binom{n+3}{3} \frac{1}{a^n} \\ &= (p+2)^3 \frac{1}{a^{p+1}} \frac{1}{\left(1 - \frac{1}{a}\right)^4} = (p+2)^3 \frac{1}{a^{p-3}(a-1)^4} \end{aligned}$$

erhält. Somit ergibt sich insgesamt

$$\sum_{n=p+1}^{\infty} \binom{n+3}{n} \frac{1}{a^n} < (p+2)^3 \frac{1}{a^{p-3}(a-1)^4},$$

womit die gewünschte Ungleichung folgt. □

## 4.2 Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung

In diesem Abschnitt wird nun die im vorigen Abschnitt 4.1 eingeführte Chebyshev-Entwicklung auf die diskrete Gauß-Transformation angewandt. Der daraus resultierende Algorithmus wird in Abschnitt 4.2.5 angegeben. Ein wesentlicher Unterschied zur schnellen Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklung besteht darin, dass die Koeffizienten der Chebyshev-Entwicklung nur in integraler Form gegeben sind. Für den Algorithmus ist es daher auch notwendig, diese Integrale numerisch zu berechnen. Eine entsprechende numerische Integrationsmethode wird im folgenden Abschnitt 4.2.1 beschrieben.

### 4.2.1 Berechnung der Koeffizienten der Chebyshev-Entwicklung

Zur Berechnung der Entwicklungskoeffizienten der im vorigen Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Reihenentwicklungen ist es notwendig, Integrale der Form

$$E_{k,\ell} = \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{\pi^2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta}(d+y-x)^2\right) T_k(x) T_\ell(y) w(x) w(y) dx dy$$

zu berechnen. In den Arbeiten von J. Tausch [18, 19] und M. Messner [12] wird dazu die Gauß-Chebyshev-Quadraturregel

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \approx \sum_{i=0}^{\varrho} g_i f(\omega_i^\varrho)$$

mit Stützstellen

$$\omega_i^\varrho = \cos\left(\frac{\pi}{2} \frac{2i+1}{\varrho+1}\right),$$

Gewichten

$$g_i = \frac{\pi}{\varrho + 1}$$

und Ordnung  $\varrho$  verwendet. Damit erhält man als Näherung der Koeffizienten

$$E_{k,\ell} \approx \frac{\gamma_k \gamma_\ell}{(\varrho + 1)^2} \sum_{i,j=1}^{\varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (d + \omega_j^\varrho - \omega_i^\varrho)^2\right) T_k(\omega_i^\varrho) T_\ell(\omega_j^\varrho).$$

**Bemerkung 4.3.** Wird als Ordnung der numerischen Integration die gleiche Ordnung wie für den Abbruch der Reihenentwicklung gewählt, also  $\varrho = p$ , dann entspricht die so erhaltene Reihe genau der Approximation, die man durch Anwendung der Interpolation nach Satz 4.6 auf die diskrete Gauß–Transformation erhält (siehe auch [12, Remark 4.1]).

### Optimale Wahl der Integrationsordnung $\varrho$

Um den Einfluss der numerischen Integration auf den Fehler der Chebyshev–Entwicklung festzustellen, wurden entsprechende numerische Tests durchgeführt. Dabei wurden jeweils 1000 Quell- und Zielpunkte zufällig im Quadrat  $[0, 1]^2$  verteilt und dann die Chebyshev–Entwicklung für eine Auswahl an Parametereinstellungen verglichen. Als Skalierungsfaktor wurde  $\delta \in \{1, 0.01, 0.001\}$ , und bei der Anzahl an Verfeinerungsschritten wurde  $step \in \{0, 1, 2\}$  getestet. Verglichen wurde dann der Approximationsfehler für verschiedene Entwicklungsgrade  $p \in \{5, 10, 15, 20\}$ , wobei für die numerische Integration der Parameter  $\varrho$  im Intervall  $[p - 3, p + 6]$  gewählt wurde. Dabei zeigte sich, dass sowohl der Entwicklungsgrad, als auch der Skalierungsfaktor und die Anzahl an Verfeinerungsschritten einen Einfluss auf den Integrationsfehler haben. Es zeigte sich aber auch, dass, wenn die Parameter so gewählt werden, dass der relative Fehler der Approximation klein genug ist (bei den oben beschriebenen Tests entsprach das einer relativen Genauigkeit von  $\varepsilon < 0.1$ ), durch die Wahl von  $\varrho = p$  der Fehler der numerischen Integration vernachlässigbar wird. Bei noch kleinerem relativen Fehler wäre es auch möglich  $\varrho < p$  zu wählen. In Abbildung 4.2 ist eines der untersuchten Beispiele dargestellt. Es wird hier die bivariate Chebyshev–Entwicklung nach Satz 4.18 betrachtet, und als Parameter wurden  $\delta = 0.01$  und  $step = 2$  gewählt. Auf der Abszisse ist dabei die verwendete Ordnung  $\varrho$  der numerischen Integration relativ zum Entwicklungsgrad  $p$  aufgetragen. Ab einem Wert von  $\varrho - p = 0 \Leftrightarrow \varrho = p$  ist bei allen betrachteten Kurven keine Verbesserung im Fehler mehr gegeben, was die Wahl von  $\varrho = p$  bestätigt.

### Anwendung der numerischen Integration

Wird nun diese numerische Integration auf die Formeln aus Abschnitt 4.1.2 angewandt, ergeben sich mit

$$\begin{aligned} \omega_\mu^\varrho &= (\omega_{\mu_1}^\varrho, \dots, \omega_{\mu_d}^\varrho) \in \mathbb{R}^d, \\ \gamma_\alpha &= \gamma_{\alpha_1} \cdots \gamma_{\alpha_d} \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

folgende Reihenentwicklungen:

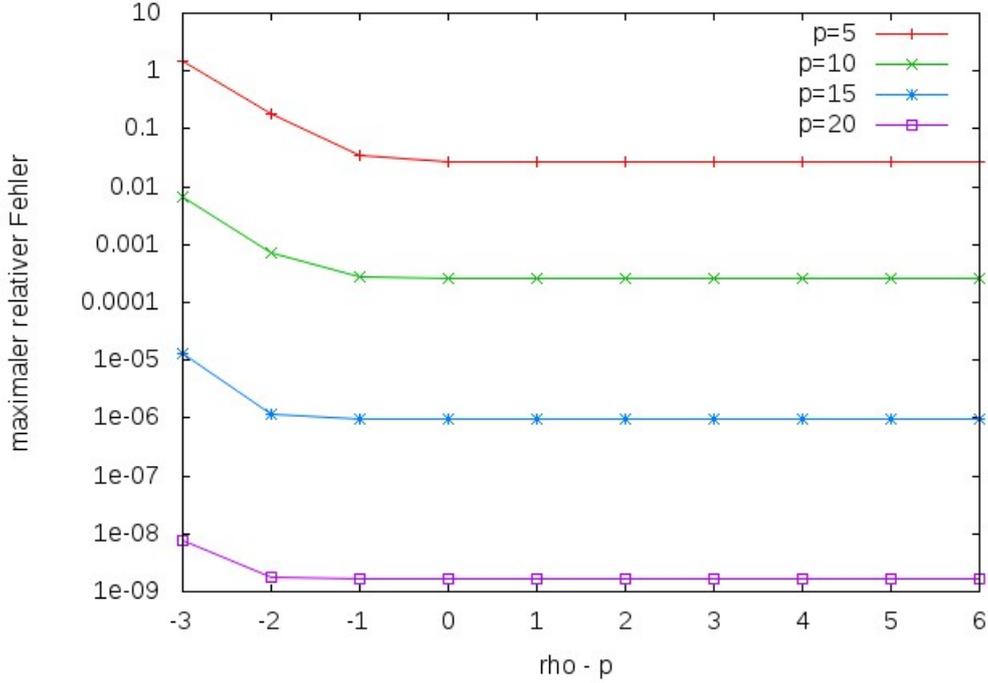


Abbildung 4.2: Einfluss der numerischen Integration auf den Fehler der bivariaten Chebyshev-Entwicklung nach Satz 4.18, wobei hier mit  $N = M = 1000$  zufällig auf  $[0, 1]^2$  verteilten Punkten und Parametern  $\delta = 0.01$  und  $step = 2$  getestet wurde.

### Chebyshev-Entwicklung für Quellen

Bei der Chebyshev-Entwicklung für eine Quellbox nach Satz 4.16 erhält man durch Anwendung der numerischen Integrationsregel auf die Koeffizienten (4.4)

$$\begin{aligned}
 G(t) &\approx \sum_{j=0}^{N_B} q_j \sum_{|\alpha| \leq p} \frac{\gamma_\alpha}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\mu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\Phi_B^{-1}(t) - \omega_\mu^\varrho|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^\varrho) T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) \\
 &= \sum_{|\alpha| \leq p} A_\alpha \frac{\gamma_\alpha}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\mu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\Phi_B^{-1}(t) - \omega_\mu^\varrho|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^\varrho), \tag{4.11}
 \end{aligned}$$

mit

$$A_\alpha = \sum_{j=0}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)). \tag{4.12}$$

Die Summation über den Multiindex  $\mu$ , mit  $\mu \leq p$ , für die numerische Berechnung der mehrdimensionalen Integrale, ist dabei komponentenweise zu verstehen. Es ist also eine Summe über  $(\varrho + 1)^d$  Terme zu bilden. Diese Reihenentwicklung ist bei einer großen Anzahl von Quellpunkten und einer kleinen Anzahl von Zielpunkten effizient, da die Berechnung der

Koeffizienten günstig, aber die Auswertung der Reihe teuer ist. Diese Reihenentwicklung entspricht somit in dieser Hinsicht der Hermite–Entwicklung (3.14).

### Chebyshev–Entwicklung für Ziele

Bei der Chebyshev–Entwicklung für eine Zielbox nach Satz 4.17 erhält man durch Anwendung der numerischen Integrationsregel auf die Koeffizienten (4.5)

$$\begin{aligned} G(t) &\approx \sum_{j=0}^{N_B} q_j \sum_{|\beta| \leq p} \frac{\gamma_\beta}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\nu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\omega_\nu^e - \Phi_C^{-1}(s_j)|^2\right) T_\beta(\omega_\nu^e) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) \\ &= \sum_{|\beta| \leq p} B_\beta T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)), \end{aligned} \quad (4.13)$$

mit

$$B_\beta = \frac{\gamma_\beta}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\nu \leq \varrho} \sum_{j=0}^{N_B} q_j \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\omega_\nu^e - \Phi_C^{-1}(s_j)|^2\right) T_\beta(\omega_\nu^e). \quad (4.14)$$

Bei dieser Reihenentwicklung ist die Berechnung der Koeffizienten teuer, aber dafür die Auswertung günstig. Somit eignet sie sich zur effizienten Auswertung der diskreten Gauß–Transformation bei einer geringen Anzahl von Quellen und einer großen Anzahl von Zielen ähnlich wie die Taylor–Entwicklung (3.17).

### Chebyshev–Entwicklung für Quellen und Ziele

Bei der bivariaten Chebyshev–Entwicklung nach Satz 4.18 erhält man durch Anwendung der numerischen Integrationsregel auf die Koeffizienten (4.6)

$$\begin{aligned} G(t) &\approx \sum_{j=0}^{N_B} q_j \sum_{|\alpha+\beta| \leq p} \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{(\varrho + 1)^{2d}} \sum_{\mu \leq \varrho} \sum_{\nu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |d + \omega_\nu^e - \omega_\mu^e|^2\right) \\ &\quad T_\alpha(\omega_\mu^e) T_\beta(\omega_\nu^e) T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) \\ &= \sum_{|\beta| \leq p} C_\beta T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)), \end{aligned} \quad (4.15)$$

mit

$$C_\beta = \sum_{|\alpha+\beta| \leq p} A_\alpha \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{(\varrho + 1)^{2d}} \sum_{\mu \leq \varrho} \sum_{\nu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |d + \omega_\nu^e - \omega_\mu^e|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^e) T_\beta(\omega_\nu^e) \quad (4.16)$$

und

$$A_\alpha = \sum_{j=0}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)).$$

Bei der bivariaten Chebyshev–Entwicklung sind sowohl die Berechnung der lokalen Beiträge der Quellboxen, als auch die Auswertung der Reihe günstig. Allerdings ist die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten bei einer großen Anzahl von Boxen teuer. Diese Reihenentwicklung entspricht der Hermite– und Taylor–Entwicklung (3.21).

### 4.2.2 Effiziente Berechnung von $C_\beta$

Die Berechnung der Koeffizienten  $C_\beta$  der Chebyshev-Entwicklung für Quellen und Ziele lässt sich, ähnlich wie bei den Koeffizienten der Hermite- und Taylor-Entwicklung in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, beschleunigen. Dafür wird wieder die Produktform der Koeffizienten ausgenutzt, wobei hier aber zusätzliche Terme in die Summation aufgenommen werden, um diese Produktform noch besser zu gewährleisten. Ein entsprechender Algorithmus wird von J. Tausch und A. Weckiewicz in [19] angegeben. Die zu berechnenden Koeffizienten lauten

$$\begin{aligned} C_\beta &= \sum_{|\alpha+\beta|\leq p} \underbrace{\sum_{j=0}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j))}_{=A_\alpha} \underbrace{\frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{(\varrho+1)^{2d}} \sum_{\mu\leq\varrho} \sum_{\nu\leq\varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |d + \omega_\nu^\varrho - \omega_\mu^\varrho|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^\varrho) T_\beta(\omega_\nu^\varrho)}_{=E_{\alpha,\beta}} \\ &= \sum_{|\alpha+\beta|\leq p} E_{\alpha,\beta} A_\alpha, \quad \forall \beta \leq p, \end{aligned}$$

wobei sich die Terme  $E_{\alpha,\beta}$  auf die einzelnen Dimensionen, hier für  $d = 2$ , aufspalten lassen:

$$E_{\alpha,\beta} = E_{\alpha_1,\beta_1} \cdot E_{\alpha_2,\beta_2}.$$

Im Gegensatz zur Hermite- und Taylor-Entwicklung sind in der Summe über  $|\alpha + \beta| \leq p$  die Indizes  $\alpha$  und  $\beta$  nicht unabhängig von einander. Das führt dazu, dass bei einer analogen Aufspaltung in zwei Summen

$$C_\beta = \sum_{\alpha_2=0}^{p-\beta_1-\beta_2} E_{\alpha_2,\beta_2} \underbrace{\sum_{\alpha_1=0}^{p-\beta_1-\beta_2-\alpha_2} E_{\alpha_1,\beta_1} A_{\alpha_1,\alpha_2}}_{=\lambda_{\alpha_2,\beta_1,\beta_2}}$$

die inneren, zuerst zu berechnenden Koeffizienten  $\lambda$  von den 3 Indizes  $\alpha_2$ ,  $\beta_1$ , und  $\beta_2$  abhängen. Man kann die Summe aber erweitern und zusätzliche Terme miteinbeziehen:

$$C_\beta = \sum_{\alpha_2=0}^{p-\beta_1} E_{\alpha_2,\beta_2} \sum_{\alpha_1=0}^{p-\alpha_2} E_{\alpha_1,\beta_1} A_{\alpha_1,\alpha_2}.$$

Dadurch wird zwar die Gesamtanzahl der berechneten Terme  $E_{\alpha,\beta} A_\alpha$  erhöht, aber die so mögliche bessere Aufspaltung der Summe führt auf eine deutliche Verringerung der Rechenzeit, da die inneren Koeffizienten  $\lambda$  nur mehr von 2 Indizes abhängen. Die Berechnung von  $C_\beta$  teilt sich somit in 2 Schritte auf:

$$\begin{aligned} \lambda_{\alpha_2,\beta_1} &= \sum_{\alpha_1=0}^{p-\alpha_2} E_{\alpha_1,\beta_1} A_{\alpha_1,\alpha_2}, \\ C_\beta &= \sum_{\alpha_2=0}^{p-\beta_1} E_{\alpha_2,\beta_2} \lambda_{\alpha_2,\beta_1}. \end{aligned}$$

### 4.2.3 Rechenaufwandsanalyse

Der Rechenaufwand für die Berechnung der Chebyshev–Entwicklungen lässt sich ähnlich wie bei den Hermite– und Taylor–Entwicklungen herleiten. Wie auch in Abschnitt 3.2.2 hängt der Rechenaufwand von der Anzahl der Quellen  $N$ , der Anzahl der Ziele  $M$ , der Raumdimension  $d$ , dem Entwicklungsgrad  $p$ , der Gesamtanzahl an Boxen  $N_{Box}$  und der Anzahl  $n$  an Nahfeldboxen ab. Zusätzlich zu diesen Parametern hängt der Rechenaufwand nun auch von der Anzahl an verwendeten Integrationspunkten  $\varrho$  für die numerische Integration ab.

#### 1. Chebyshev–Entwicklung für Quellen

Zu berechnen ist die Entwicklung (4.11)

$$G(t) = \sum_B \sum_{|\alpha| \leq p} A_\alpha(B) \frac{\gamma_\alpha}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\mu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\Phi_B^{-1}(t) - \omega_\mu^e|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^e) + E_{CS}(p),$$

mit Koeffizienten

$$A_\alpha(B) = \sum_{j=0}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)).$$

Die Koeffizienten  $A_\alpha$  müssen für alle  $|\alpha| \leq p$  berechnet werden, nach Korollar 4.15 ist das eine Anzahl von  $\binom{p+d}{d}$  Termen. Da dabei der Beitrag von allen  $N$  Quellpunkten einfließt, ergibt das einen Aufwand von  $\mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d} N\right)$  für die Berechnung der  $A_\alpha$ . Die Reihe muss dann in jedem der  $M$  Zielpunkte ausgewertet werden, wobei wie in Abschnitt 2.3 beschrieben der Beitrag aus  $(2n+1)^d$  Boxen berücksichtigt wird. Außerdem muss das Integral durch numerische Integration berechnet werden, was zu einer Summation über  $(\varrho + 1)^d$  Integrationspunkte führt. Das ergibt einen Aufwand von  $\mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d} (2n+1)^d (\varrho + 1)^d M\right)$ . Der Gesamtaufwand der Chebyshev–Entwicklung für Quellen ist somit

$$\mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d} N\right) + \mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d} (2n+1)^d (\varrho + 1)^d M\right).$$

#### 2. Chebyshev–Entwicklung für Ziele

Zu berechnen ist die Entwicklung (4.13)

$$G(t) = \sum_B \sum_{|\beta| \leq p} B_\beta(B) T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CT}(p),$$

mit Koeffizienten

$$B_\beta(B) = \frac{\gamma_\beta}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\nu \leq \varrho} \sum_{j=0}^{N_B} q_j \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\omega_\nu^e - \Phi_C^{-1}(s_j)|^2\right) T_\beta(\omega_\nu^e).$$

Der Aufwand zur Aufstellung und Auswertung dieser Reihenentwicklung erfolgt analog zur Chebyshev-Entwicklung für Quellen, nur dass die Rolle von Quellen und Zielen vertauscht ist. Der Gesamtaufwand beträgt daher

$$\mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d}(2n+1)^d(\varrho+1)^d N\right) + \mathcal{O}\left(\binom{p+d}{d}M\right).$$

### 3. Chebyshev-Entwicklung für Quellen und Ziele

Zu berechnen ist die Entwicklung (4.15)

$$G(t) = \sum_{|\beta| \leq p} C_\beta T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CST}(p),$$

mit Koeffizienten

$$C_\beta = \sum_{|\alpha+\beta| \leq p} A_\alpha \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{(\varrho+1)^{2d}} \sum_{\mu \leq \varrho} \sum_{\nu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |d + \omega_\nu^\varrho - \omega_\mu^\varrho|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^\varrho) T_\beta(\omega_\nu^\varrho)$$

und

$$A_\alpha = \sum_{j=0}^{N_B} q_j T_\alpha(\Phi_B^{-1}(s_j)).$$

Für die Berechnung der Koeffizienten  $A_\alpha$  und für die Auswertung der Entwicklung ergibt sich, wie bereits bei den Punkten 1. und 2. erwähnt, ein Aufwand von

$$\mathcal{O}\left((N+M)\binom{p+d}{d}\right).$$

Für die Berechnung der  $C_\beta$  muss, nach Abschnitt 2.3, für jede der  $N_{Box}$  Zielboxen der Beitrag von  $(2n+1)^d$  Quellboxen berücksichtigt werden. Da in zwei Variablen numerisch integriert wird, ist der Aufwand dafür nun  $(\varrho+1)^{2d}$ . Durch die Summe über zwei Multiindizes müssen  $\binom{p+2d}{2d}$  Terme berechnet werden. Somit ergibt sich ein Gesamtaufwand für die Berechnung der  $C_\beta$  von

$$\mathcal{O}\left(\binom{p+2d}{2d}(2n+1)^d N_{Box}(\varrho+1)^{2d}\right).$$

Mit der bereits beschriebenen effizienten Berechnung für die Summe über die Multiindizes lässt sich der Rechenaufwand auf

$$\mathcal{O}\left(d(p+1)\binom{p+d}{d}(2n+1)^d N_{Box}(\varrho+1)^{2d}\right)$$

reduzieren. Somit ergibt sich für den Gesamtaufwand der bivariaten Chebyshev-Entwicklung

$$\mathcal{O}\left(N\binom{p+d}{d}\right) + \mathcal{O}\left(d(p+1)\binom{p+d}{d}(2n+1)^d N_{Box}(\varrho+1)^{2d}\right) + \mathcal{O}\left(M\binom{p+d}{d}\right).$$

#### 4.2.4 Vergleich des Rechenaufwands mit Hermite- und Taylor-Entwicklung

Der Rechenaufwand der Chebyshev-Entwicklungen unterscheidet sich von dem der Hermite- und Taylor-Entwicklungen dadurch, dass ein anderes Abbruchkriterium für die Anzahl der Entwicklungskoeffizienten verwendet wird. Und zwar werden beim Vergleich mit der Entwicklungsordnung  $p$  bei der Chebyshev-Entwicklung Einträge gemäß der Summe über den Multiindex herangezogen und bei der Hermite- und Taylor-Entwicklung wird komponentenweise abgebrochen. Somit werden, bei gleicher Entwicklungsordnung  $p$ , bei einer Chebyshev-Entwicklung weniger Koeffizienten benötigt als bei einer Hermite- und Taylor-Entwicklung. Der Unterschied wird mit steigender Raumdimension größer, was sich auch im Rechenaufwand widerspiegelt. Außerdem muss für die Koeffizienten der Chebyshev-Entwicklung ein Integral numerisch berechnet werden, wobei die Anzahl  $\varrho$  der Integrationspunkte in der Größenordnung von  $p$  zu wählen ist. In Tabelle 4.1 ist der Rechenaufwand der einzelnen Operationen in Abhängigkeit von der Raumdimension  $d$ , dem Entwicklungsgrad  $p$  und der Anzahl  $\varrho$  an Stützstellen für die numerische Integration dargestellt. Für die Berechnung von  $A_\alpha$  ergibt sich beispielsweise jeweils ein Rechenaufwand von  $\mathcal{O}(p^d)$ , wobei aber bei der Chebyshev-Entwicklung die Konstante kleiner ist. Vor allem für größeres  $d$  ist somit hier die Chebyshev-Entwicklung deutlich schneller als die Hermite- und Taylor-Entwicklung. Bei einigen Operationen der Chebyshev-Entwicklung ist allerdings ein

	Hermite/Taylor	Chebyshev
Berechnung $A_\alpha$	$(p + 1)^d$	$\binom{p+d}{d}$
Berechnung $B_\beta$	$(p + 1)^d$	$\binom{p+d}{d}(\varrho + 1)^d$
Auswertung Quell-Entwicklung	$(p + 1)^d$	$\binom{p+d}{d}(\varrho + 1)^d$
Auswertung Ziel-Entwicklung	$(p + 1)^d$	$\binom{p+d}{d}$
Box-Box Interaktion ( $C_\beta$ )	$(p + 1)^{2d}$	$\binom{p+2d}{2d}(\varrho + 1)^{2d}$
effiziente Box-Box Interaktion ( $C_\beta$ )	$d(p + 1)^d$	$d(p + 1)\binom{p+d}{d}(\varrho + 1)^{2d}$

Tabelle 4.1: Vergleich des Rechenaufwands für die Berechnung der Hermite- und Taylor-Koeffizienten mit dem der Chebyshev-Koeffizienten bezüglich der Raumdimension  $d$ , dem Entwicklungsgrad  $p$  und der Anzahl  $\varrho$  an Stützstellen für die numerische Integration.

Integral numerisch zu berechnen. Wie in Abschnitt 4.2.1 beschrieben, ist der Parameter  $\varrho$  dabei in der Größenordnung der Entwicklungsordnung  $p$  zu wählen. Dadurch ergibt sich auf

den ersten Blick ein deutlich höherer Rechenaufwand bei der Chebyshev-Entwicklung. Numerische Tests zeigten aber, dass bei der Chebyshev-Entwicklung für das Erreichen einer gewünschten Genauigkeit  $\varepsilon$  ein etwas geringerer Entwicklungsgrad  $p$  benötigt wird, als bei der Hermite- und Taylor-Entwicklung. Außerdem wird bei den praktischen Anwendungen der schnellen Gauß-Transformation der Algorithmus meist nicht einmal, sondern mehrfach ausgeführt. Falls dabei die Quell- und Zielpunkte unverändert bleiben, können die Summen für die numerische Integration zwischengespeichert und wiederverwendet werden. Dadurch ist der Aufwand für deren Berechnung nur einmal zu zählen, und die Chebyshev-Entwicklung ist dann deutlich schneller als die Hermite- und Taylor-Entwicklung.

### 4.2.5 Algorithmus

In diesem Abschnitt wird nun der Algorithmus der schnellen Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung zur Berechnung der diskreten Gauß-Transformation beschrieben. Gegeben seien Quell- und Zielpunkte  $s_j, t_i \in B_0 = [0, 1]^d$  und Gewichten  $q_j \in \mathbb{R}$  mit  $j = 1, \dots, N$ ,  $i = 1, \dots, M$  und ein Skalierungsfaktor  $\delta > 0$ . Außerdem sei ein Parameter  $\varepsilon > 0$  gegeben, der die gewünschte Genauigkeit angibt, mit der die diskrete Gauß-Transformation berechnet werden soll. Nun müssen die folgenden Parameter für den Algorithmus gewählt werden:

- $N_{Box}$  ist die Anzahl an Boxen, in die die Ausgangsbox  $B_0$  unterteilt wird.
- $p$  ist der maximale Entwicklungsgrad der verwendeten Reihenentwicklungen (4.11), (4.13) und (4.15).
- $n$  beschreibt die Anzahl der Boxen, die bei der Auswertung einer Reihenentwicklung berücksichtigt werden (siehe Abschnitt 2.3).
- $\varrho$  beschreibt die Ordnung der numerischen Integration zur Bestimmung der Entwicklungskoeffizienten (siehe Abschnitt 4.2.1).
- $N_F$  und  $M_L$  sind Schranken für die Punktzahl innerhalb einer Box, ab der zwischen einer direkten Auswertung und einer Reihenentwicklung gewechselt wird.

In Algorithmus 3 wird zunächst in einer doppelten Schleife über alle Boxen der Beitrag jeder Quellbox auf alle Zielboxen berechnet. Die äußere Schleife läuft dabei über alle Quellboxen, und die innere Schleife über alle Zielboxen, wobei hier mit Hilfe des Parameters  $n$  entschieden wird, ob die aktuelle Zielbox berücksichtigt werden muss, oder vernachlässigt werden kann. Ob der zu berechnende Beitrag direkt oder über eine Reihenentwicklung erfolgt, wird durch die Parameter  $N_F$  und  $M_L$  entschieden.

Nachdem die Beiträge der Quellboxen verteilt wurden, wird in einer zweiten Schleife über alle Zielboxen in denjenigen Boxen, in denen eine Chebyshev-Entwicklung nach der Zielvariablen gemacht wurde, diese in allen Zielpunkten ausgewertet.

**Algorithmus 3** FGT mit Chebyshev–Entwicklung

---

**for**  $k = 1, N_{Box}$  **do** ▷ Schleife über alle Quellboxen  
   **if**  $N_{B_k} < N_F$  **then** ▷ direkter Beitrag der  $N_{B_k}$  Quellen  
     **for**  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  **do** ▷ Schleife über Nahfeldboxen  
       **if**  $M_{C_\ell} < M_L$  **then** ▷ direkte Auswertung von (2.1) für die  $N_{B_k}$  Quellen  
         
$$G(t_i) += \sum_{j=1}^{N_{B_k}} q_j e^{-|t_i - s_j|^2 / \delta}, \quad i = 1, M_{C_\ell}$$
  
       **else** ▷ Berechnung der Chebyshev–Koeffizienten für  $N_{B_k}$  Quellen nach (4.14)  
         
$$C_\beta(C_\ell) += \frac{\gamma_\beta}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\nu \leq \varrho} \sum_{j=0}^{N_{B_k}} q_j \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\omega_\nu^\varrho - \Phi_{C_\ell}^{-1}(s_j)|^2\right) T_\beta(\omega_\nu^\varrho),$$
  
 $\forall |\beta| \leq p$   
       **end if**  
     **end for**  
   **else** ▷ Berechnung der Chebyshev–Koeffizienten für  $N_{B_k}$  Quellen nach (4.12)  
     
$$A_\alpha = \sum_{j=0}^{N_{B_k}} q_j T_\alpha(\Phi_{B_k}^{-1}(s_j)), \quad \forall |\alpha| \leq p$$
  
     **for**  $\ell = 1, (2n + 1)^d$  **do** ▷ Schleife über Nahfeldboxen  
       **if**  $M_{C_\ell} < M_L$  **then** ▷ direkte Auswertung der Chebyshev–Entwicklung  
         
$$G(t_i) += \sum_{|\alpha| \leq p} A_\alpha \frac{\gamma_\alpha}{(\varrho + 1)^d} \sum_{\mu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |\Phi_{B_k}^{-1}(t_i) - \omega_\mu^\varrho|^2\right) T_\alpha(\omega_\mu^\varrho),$$
  
 $i = 1, M_{C_\ell}$   
       **else** ▷ Berechnung der Koeffizienten der Chebyshev–Entwicklung nach (4.16)  
         
$$C_\beta(C_\ell) += \sum_{|\alpha + \beta| \leq p} A_\alpha \frac{\gamma_\alpha \gamma_\beta}{(\varrho + 1)^{2d}} \sum_{\mu \leq \varrho} \sum_{\nu \leq \varrho} \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} |d + \omega_\nu^\varrho - \omega_\mu^\varrho|^2\right)$$
  
 $T_\alpha(\omega_\mu^\varrho) T_\beta(\omega_\nu^\varrho), \quad \forall |\beta| \leq p$   
       **end if**  
     **end for**  
   **end if**  
**end for**  
**for**  $\ell = 1, N_{Box}$  **do** ▷ Schleife über alle Zielboxen  
   **if**  $M_{C_\ell} \geq M_L$  **then** ▷ Auswertung der Chebyshev–Entwicklung  
     
$$G(t_i) += \sum_{|\beta| \leq p} C_\beta T_\beta(\Phi_{C_\ell}^{-1}(t_i)), \quad i = 1, M_{C_\ell}$$
  
   **end if**  
**end for**

---

# 5 Numerische Tests und Vergleiche

In diesem Kapitel werden nun die in den vorigen Kapiteln 3 und 4 eingeführten Algorithmen zur numerischen Approximation der diskreten Gauß-Transformation verglichen. Dazu wurden die Algorithmen für  $d = 2$  in C++ implementiert. Als Compiler wurde der GNU g++ Compiler verwendet. Da in der Praxis durch eine geeignete Modifikation des Skalierungsfaktors die Quell- und Zielpunkte immer auf  $[0, 1]^2$  skaliert werden können, wurden, falls nicht anders angegeben, für die folgenden Untersuchungen die Quell- und Zielpunkte immer zufällig in  $[0, 1]^2$  generiert. Die Gewichte  $q_j$  wurden ebenfalls zufällig in  $[0, 1]$  gewählt. In den ersten beiden Abschnitten werden die theoretischen Fehlerabschätzungen von einerseits der Hermite- und Taylor-Entwicklung und andererseits der Chebyshev-Entwicklung gesondert mit den Fehlern der numerischen Beispiele verglichen. Im dritten Abschnitt werden dann die beiden Methoden miteinander verglichen.

## 5.1 Numerische Tests zur Hermite- und Taylor-Entwicklung

In diesem Abschnitt werden numerische Beispiele zur Approximation der diskreten Gauß-Transformation durch Hermite- und Taylor-Entwicklung beschrieben. Dabei wird der Fehler dieser Approximationen mit den theoretischen Schranken aus Kapitel 3 verglichen. Die Ergebnisse werden hier nur grob angegeben, für Details siehe das Masterprojekt [9]. In den folgenden Grafiken werden die theoretischen Abschätzungen sowie die tatsächlichen Fehler der Testrechnungen der Hermite-Entwicklung mit **Abschätzung H** und **Fehler H** bezeichnet. Analoges gilt für die Taylor-Entwicklung **T** und die kombinierte Hermite- und Taylor-Entwicklung **H-T**.

### 5.1.1 Überprüfung der Fehlerabschätzungen

In Abbildung 5.1 werden die maximalen absoluten Fehler der verschiedenen Hermite- und Taylor-Entwicklungen mit den entsprechenden theoretischen Fehlerabschätzungen verglichen. Es wurden dabei jeweils 1000 Quell- und Zielpunkte gleichmäßig und zufällig in  $[0, 1]^2$  verteilt, und als Parameter  $\delta = 1$  und  $step = 2$  gewählt. Bei der Hermite-Entwicklung ist der Fehler deutlich geringer, wobei sich aber eine Stufenbildung im Fehler zeigt. Ab einer Entwicklungsordnung von  $p = 11$  ist die Maschinengenauigkeit erreicht, wodurch sich der Fehler nicht mehr verringert.

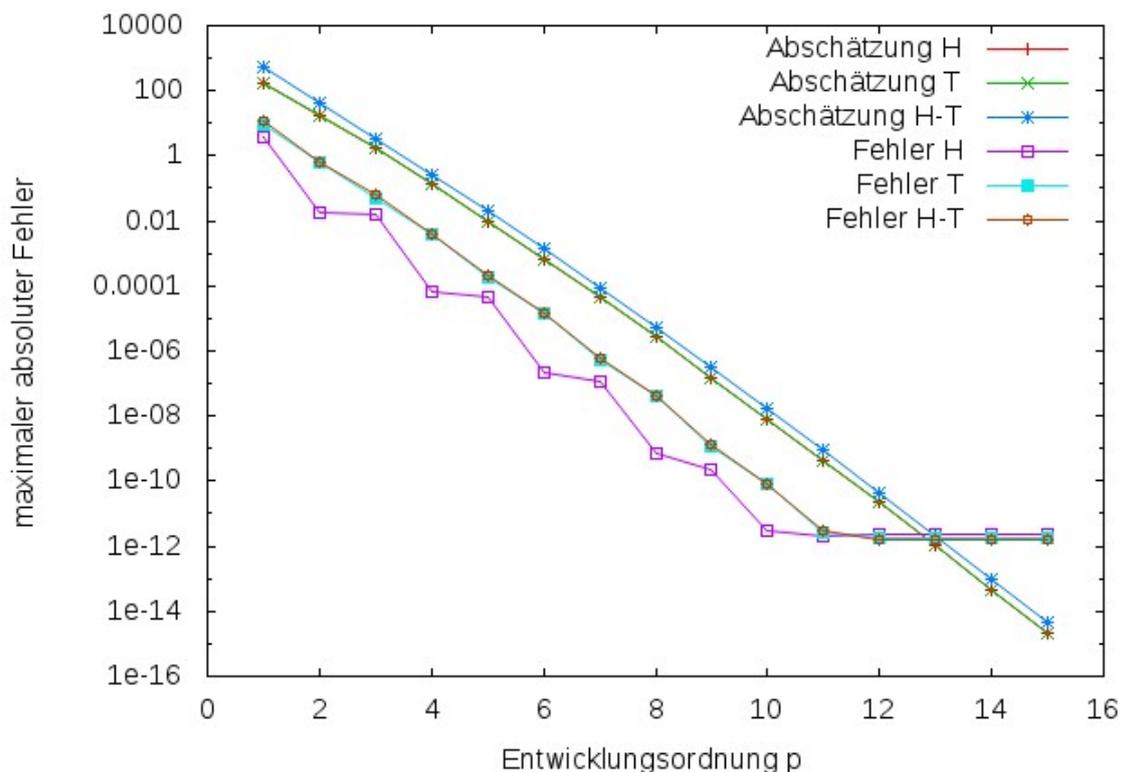


Abbildung 5.1: Vergleich des maximalen absoluten Fehlers der Hermite- und Taylor-Entwicklungen mit den theoretischen Fehlerabschätzungen. Als Parameter wurden  $N = M = 1000$ ,  $\delta = 1$  und  $step = 2$  gewählt.

### 5.1.2 Fehler bei nicht symmetrischer Punktverteilung

In Abbildung 5.2 werden die maximalen absoluten Fehler der verschiedenen Hermite- und Taylor-Entwicklungen verglichen, wobei die Quellpunkte nicht mehr symmetrisch um das Entwicklungszentrum verteilt sind. Dafür wurden jeweils 250 Quell- und Zielpunkte gewählt, wobei die Quellen gleichmäßig in der kleineren Box  $[0, 0.5]^2$  verteilt sind, und die Ziele in  $[0, 1]^2$ . Es wurde keine Verfeinerung der Ausgangsbox  $B_0 = [0, 1]^2$  vorgenommen ( $step = 0$ ), wodurch die Quellpunkte im Gegensatz zum vorherigen Test in Abbildung 5.1 nicht mehr symmetrisch um das Entwicklungszentrum  $s_B = (0.5, 0.5)$  verteilt sind. Nun ist bei der Hermite-Entwicklung keine Stufenbildung mehr zu beobachten. Für ausführlichere Untersuchungen zur nicht monotonen Konvergenz der Hermite- und Taylor-Entwicklung siehe das Masterprojekt [9]. Der Ausreißer in der Abschätzung der Hermite- und Taylor-Entwicklung tritt auf, da diese Parameterkombination die Zulässigkeitsbedingung  $2r < 1$  aus Satz 3.18 nicht erfüllt.

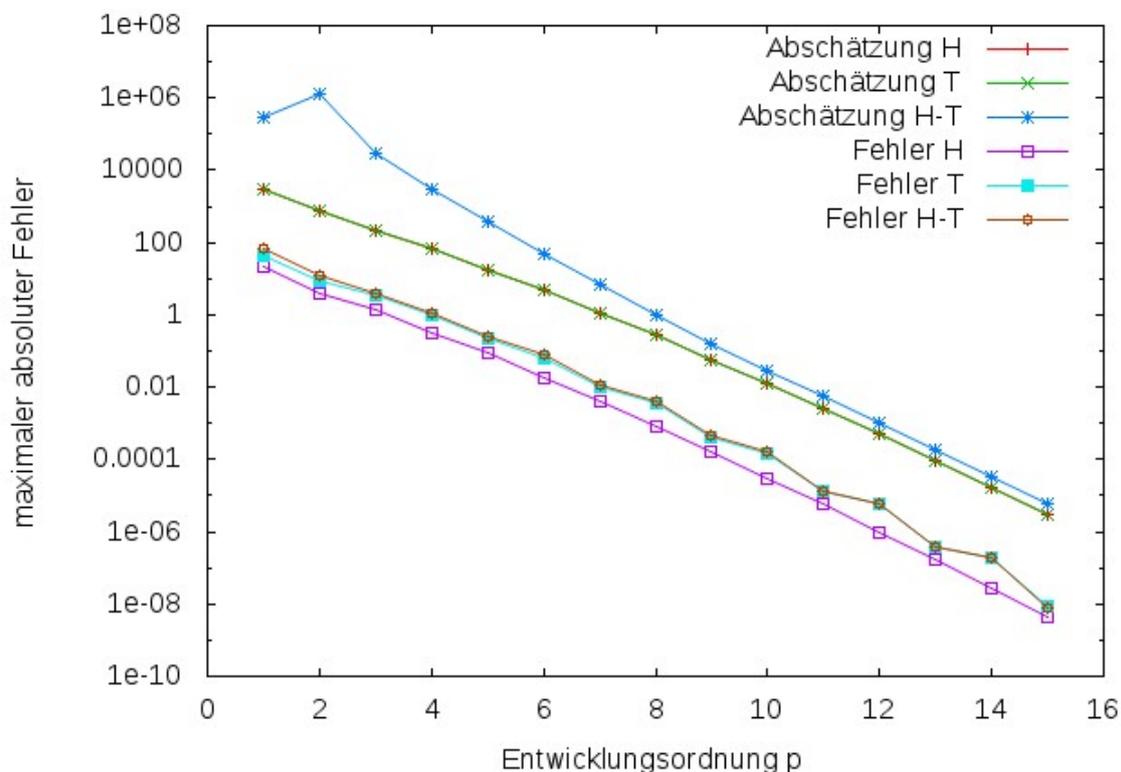


Abbildung 5.2: Vergleich des maximalen absoluten Fehlers wobei die 250 Quellpunkte in der kleineren Box  $[0, 0.5]^2$  liegen und die Zielpunkte gleichmäßig in  $[0, 1]^2$  verteilt sind.

### 5.1.3 Vergleich für verschiedene Verfeinerungsstufen

In Abbildung 5.3 wird die Konvergenzordnung der bivariaten Hermite- und Taylor-Entwicklung für verschiedene Verfeinerungsstufen verglichen. Auch hier zeigt sich die Stufenbildung im Fehler, wenn alle Quellpunkte symmetrisch um das Entwicklungszentrum verteilt sind.

## 5.2 Numerische Tests zur Chebyshev-Entwicklung

Einige numerische Tests zur in Kapitel 4 eingeführten Chebyshev-Entwicklung zur Approximation der diskreten Gauß-Transformation werden in diesem Abschnitt beschrieben. Ein wesentlicher Unterschied zu der im vorigen Abschnitt 5.1 behandelten Hermite- und Taylor-Entwicklung ist, neben der bereits in Abschnitt 4.2.1 untersuchten numerischen Integration, dass die theoretischen Fehlerabschätzungen von einem beliebig wählbaren Parameter  $a > 1$  abhängen. Somit muss, um eine optimale Abschätzung zu erhalten, dieser Parameter erst optimiert werden. Im folgenden Abschnitt werden einige numerische Tests dazu gemacht. Danach folgen Tests zur Konvergenz. Zum Schluss wird der Einfluss der in

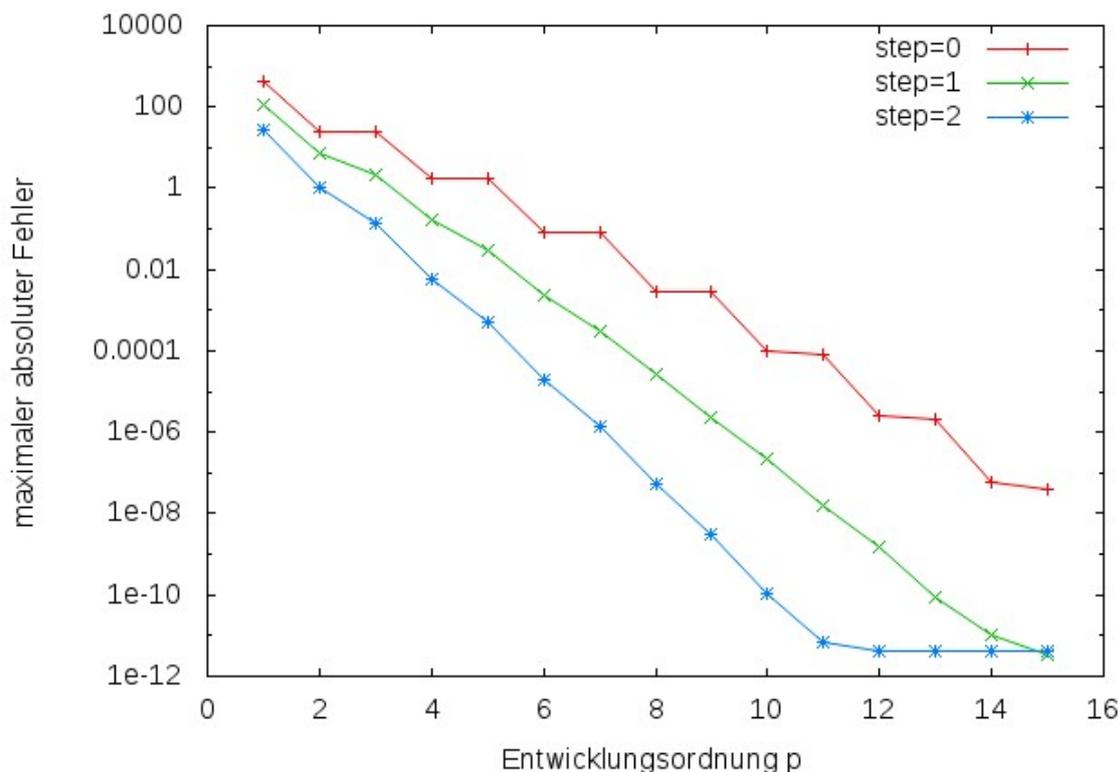


Abbildung 5.3: Vergleich der Konvergenzordnungen der bivariaten Hermite- und Taylor-Entwicklung für verschiedene Verfeinerungsstufen  $step \in \{0, 1, 2\}$  und Skalierungsfaktor  $\delta = 1$  und Punktzahlen  $N = 2000$  und  $M = 1000$ .

Kapitel 2 beschriebenen Vernachlässigung von weit entfernten Punkten auf die Chebyshev-Entwicklung untersucht.

### 5.2.1 Abschätzung der Chebyshev-Entwicklungskoeffizienten

Für die Abschätzung des Gesamtfehlers der Chebyshev-Entwicklung ist es notwendig die einzelnen Entwicklungskoeffizienten abzuschätzen. Entsprechende Abschätzungen wurden in Abschnitt 4.1.1 angegeben. Im Gegensatz zu den Abschätzungen der Hermite- und Taylor-Koeffizienten hängen diese Abschätzungen von einem beliebig wählbaren Parameter  $a > 0$  ab. Um eine optimale Abschätzung zu erhalten, muss dieser Parameter optimiert werden. In diesem Abschnitt werden nun ein paar numerische Tests dazu präsentiert, und die Abschätzungen mit den tatsächlichen Werten der Koeffizienten verglichen.

Die Entwicklungskoeffizienten der eindimensionalen Chebyshev-Entwicklung für eine Quellbox lauten nach Satz 4.7

$$E_n(t) = \frac{\gamma_n}{\pi} \int_{-1}^1 \exp\left(-\frac{h^2}{\delta} (\Phi_B^{-1}(t) - x)^2\right) T_n(x) w(x) dx, \quad (5.1)$$

mit  $\Phi_B^{-1}(t) = \frac{t-s_B}{h}$ . Nach Satz 4.9 erfüllen sie die Abschätzung

$$|E_n(t)| \leq \frac{\gamma_n}{a^n} \exp\left(\frac{h^2}{4\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right),$$

für  $n \in \mathbb{N}_0$ ,  $t \in \mathbb{R}$  und beliebiges  $a > 0$ . Um die bestmögliche Abschätzung zu erhalten, muss diese Fehlerabschätzung nach  $a$  minimiert werden. Durch Differentiation nach  $a$  erhält man den Ausdruck

$$\frac{h^2}{2\delta}(a^4 - 1) - na^2 = 0,$$

und die Substitution  $u = a^2$  führt auf

$$u^2 - \frac{2\delta n}{h^2}u - 1 = 0.$$

Diese Gleichung kann nun mit der Lösungsformel für quadratische Gleichungen gelöst werden. Wegen der Bedingung  $a > 0$ , müssen die negativen Wurzeln nicht berücksichtigt werden, und man erhält als einzige zulässige Lösung

$$a = \sqrt{\frac{\delta n}{h^2} + \sqrt{\left(\frac{\delta n}{h^2}\right)^2 + 1}}.$$

Um die Fehlerabschätzung mit den tatsächlichen Entwicklungskoeffizienten zu vergleichen, müssen diese nach  $t$  maximiert werden. Da der Integrand für  $t \rightarrow \infty$  gegen Null geht, wird das Maximum in der Nähe des Entwicklungszentrums angenommen. Zur Bestimmung des Maximums wurde das Integral in (5.1) daher für 31 Testpunkte, die in der Nähe des Entwicklungszentrums  $s_B$  gewählt wurden, durch numerische Integration ausgewertet. Als Näherung des Maximums wurde dann das Maximum dieser 31 Auswertungen genommen. Diese Berechnungen wurden mit Matlab 2017a durchgeführt, wobei für die numerische Integration die Funktion `integral` verwendet wurde. In Abbildung 5.4 wird das Maximum von  $E_n(t)$  mit der theoretischen Abschätzung für verschiedene Skalierungsfaktoren  $\delta$  verglichen. Als Parameter für die Anzahl der Verfeinerungsschritte wurde dabei  $step = 0$  gewählt, wodurch sich  $h = 0.5$  ergibt. Es zeigt sich, dass die Koeffizienten zwar etwas überschätzt werden, der asymptotische Verlauf aber korrekt wiedergegeben wird. Ein ähnlicher Vergleich wird auch von J. Tausch und A. Weckiewicz in [19] gemacht.

### 5.2.2 Überprüfung des Fehlers der Chebyshev–Entwicklung

In diesem Abschnitt werden nun die Abschätzungen für den maximalen absoluten Fehler der verschiedenen Chebyshev–Entwicklungen mit den tatsächlichen Fehlern verglichen. Wie bereits in Abschnitt 5.2.1 erwähnt, muss dazu erst der optimale Parameter  $a$  in den Fehlerabschätzungen bestimmt werden. Im Gegensatz zu den Abschätzungen der Koeffizienten kann dies bei den Abschätzungen des Gesamtfehlers nicht mehr analytisch gemacht werden. Stattdessen muss wieder auf eine numerische Methode zurückgegriffen werden. Die Details dazu werden im Folgenden erklärt.

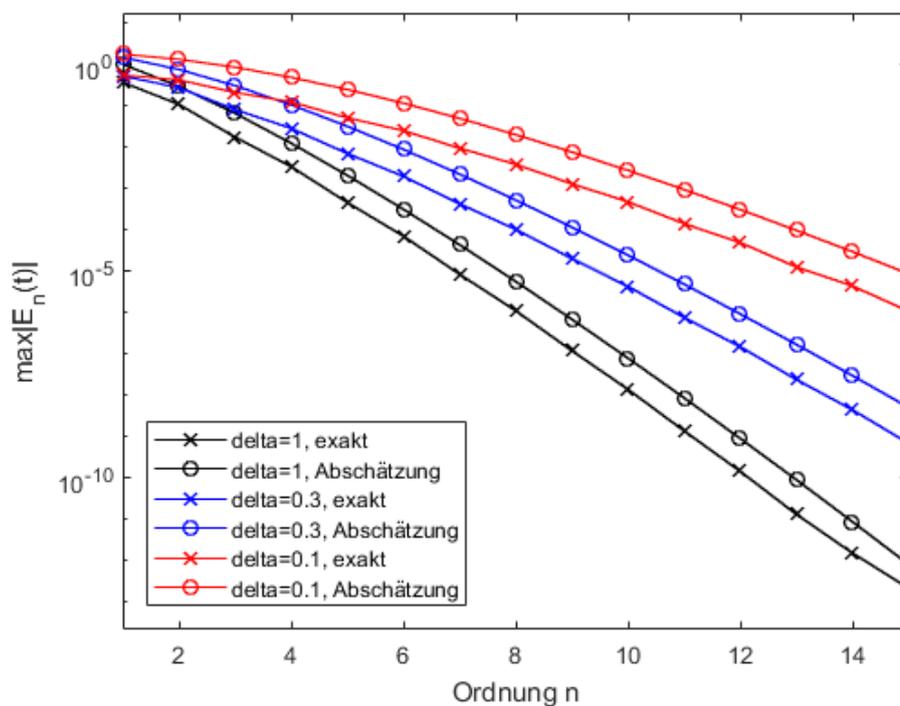


Abbildung 5.4: Vergleich der eindimensionalen Chebyshev-Koeffizienten  $E_n(t)$  mit der theoretischen Fehlerabschätzung für den Parameter  $h = 0.5$  und verschiedene Skalierungsfaktoren  $\delta \in \{0.1, 0.3, 1\}$ .

### Bivariate Entwicklung für Quellen und Ziele

Für die bivariate Chebyshev-Entwicklung

$$G(t) = \sum_{|\beta| \leq p} C_\beta T_\beta(\Phi_C^{-1}(t)) + E_{CST}(p)$$

gilt nach Satz 4.18 die Fehlerabschätzung

$$|E_{CST}(p)| \leq Q \cdot 16 \exp\left(2 \frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right) (p+2)^3 \frac{1}{a^{p-3}(a-1)^4}$$

für beliebiges  $a > 1$  und mit  $Q = \sum_{j=1}^N |q_j|$ . Für eine optimale Abschätzung von  $E_{CST}(p)$  muss

$$\exp\left(2 \frac{h^2}{\delta} \left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right) \frac{1}{a^{p-3}(a-1)^4}$$

Parameter	Wert
Quellen $N$	100
Ziele $M$	100
Skalierungsfaktor $\delta$	1
Verfeinerungsstufen $step$	2

Tabelle 5.1: Wahl der Parameter für den numerischen Test zum Vergleich der theoretischen Abschätzungen mit dem tatsächlichen Fehler.

minimiert werden. Somit ist eine Nullstelle mit  $a > 1$  des Ausdrucks

$$4\frac{h^2}{\delta}(a^4 - 1)(a - 1) - (p + 1)a^3 + (p - 3)a^2$$

gesucht. Mit den Parametern aus Tabelle 5.1 und  $h = 2^{-(step+1)} = \frac{1}{8}$  ergibt das

$$\frac{1}{16}(a^4 - 1)(a - 1) - (p + 1)a^3 + (p - 3)a^2.$$

Da die Nullstellen dieses Polynoms 5. Grades nicht analytisch angegeben werden können, müssen sie numerisch bestimmt werden. Dies wurde hier durch Bisektion gemacht, wobei als Schranke für den absoluten Fehler von  $a$  der Wert  $10^{-12}$  gewählt wurde.

### Entwicklung für Quellen oder Ziele

Für eine einfache Chebyshev-Entwicklung nach Quellen (Satz 4.16) oder nach Zielen (Satz 4.17) lautet die Fehlerabschätzung

$$|E_{CS}(p)| = |E_{CT}(p)| \leq QC(h, \delta, a)(p + 2)\frac{1}{a^{p-1}(a - 1)^2},$$

mit

$$C(h, \delta, a) = 4 \exp\left(\frac{h^2}{2\delta}\left(a - \frac{1}{a}\right)^2\right).$$

Für eine optimale Abschätzung ist eine Nullstelle mit  $a > 1$  von

$$\frac{h^2}{\delta}(a^4 - 1)(a - 1) - (p + 1)a^3 + (p - 1)a^2$$

gesucht. Analog zu der bivariaten Entwicklung zuvor, wird auch hier der optimale Wert von  $a$  durch Bisektion bestimmt.

**Bemerkung 5.1.** Für ein optimales  $a$  müssen Nullstellen  $a > 1$  der Polynome

$$q_1(a) = 4\frac{h^2}{\delta}(a^4 - 1)(a - 1) - (p + 1)a^3 + (p - 3)a^2$$

und

$$q_2(a) = \frac{h^2}{\delta}(a^4 - 1)(a - 1) - (p + 1)a^3 + (p - 1)a^2$$

gefunden werden, wobei für die Parameter  $h, \delta > 0$  und  $p \geq 0$  gilt. Wegen

$$q_1(1) = -(p + 1) + (p - 3) = -4 < 0$$

$$q_2(1) = -(p + 1) + (p - 1) = -2 < 0$$

und

$$\lim_{a \rightarrow \infty} q_1(a) = \infty$$

$$\lim_{a \rightarrow \infty} q_2(a) = \infty$$

existiert mindestens eine solche Nullstelle.

Die für die Abschätzungen in Abbildung 5.5 berechneten Werte von  $a$  sind in Tabelle 5.2 aufgelistet. Dabei zeigt sich, dass der optimale Wert von  $a$  mit steigendem Entwicklungsgrad leicht zunimmt. In Abbildung 5.5 sind nun die maximalen absoluten Fehler der

p	h	$\delta$	$a(\text{CS,CT})$	$a(\text{CST})$
1	0.125	1	11.825	6.5929
2	0.125	1	14.202	7.5973
3	0.125	1	16.260	8.5164
4	0.125	1	18.097	9.3629
5	0.125	1	19.769	10.149
6	0.125	1	21.314	10.885
8	0.125	1	24.115	12.235
10	0.125	1	26.627	13.459

Tabelle 5.2: Mittels Bisektion bestimmte optimale Werte von  $a$  für die Fehlerabschätzungen der Chebyshev-Entwicklungen. Das Optimum für eine Entwicklung nach Quellen oder Zielen ist in Spalte 4 angegeben, das für eine bivariate Entwicklung in Spalte 5.

verschiedenen Entwicklungen mit den entsprechenden Fehlerabschätzungen mit  $a$  aus Tabelle 5.2 dargestellt. Es zeigt sich dabei, dass die Fehlerabschätzungen zwar asymptotisch den Verlauf des Fehlers widerspiegeln, aber vor allem bei der bivariaten Entwicklung den tatsächlichen Fehler weit überschätzen. Diese Tatsache, und die Tatsache, dass für die Berechnung der optimalen Fehlerabschätzung ein Parameter optimiert werden muss, machen die Fehlerabschätzung unbrauchbar für die Wahl von Parametern wie Anzahl der Verfeinerungsstufen, oder benötigter Entwicklungsgrad um eine gewisse Genauigkeit zu erreichen. Sie zeigt aber mit welcher Konvergenzrate bei der Approximation zu rechnen ist.

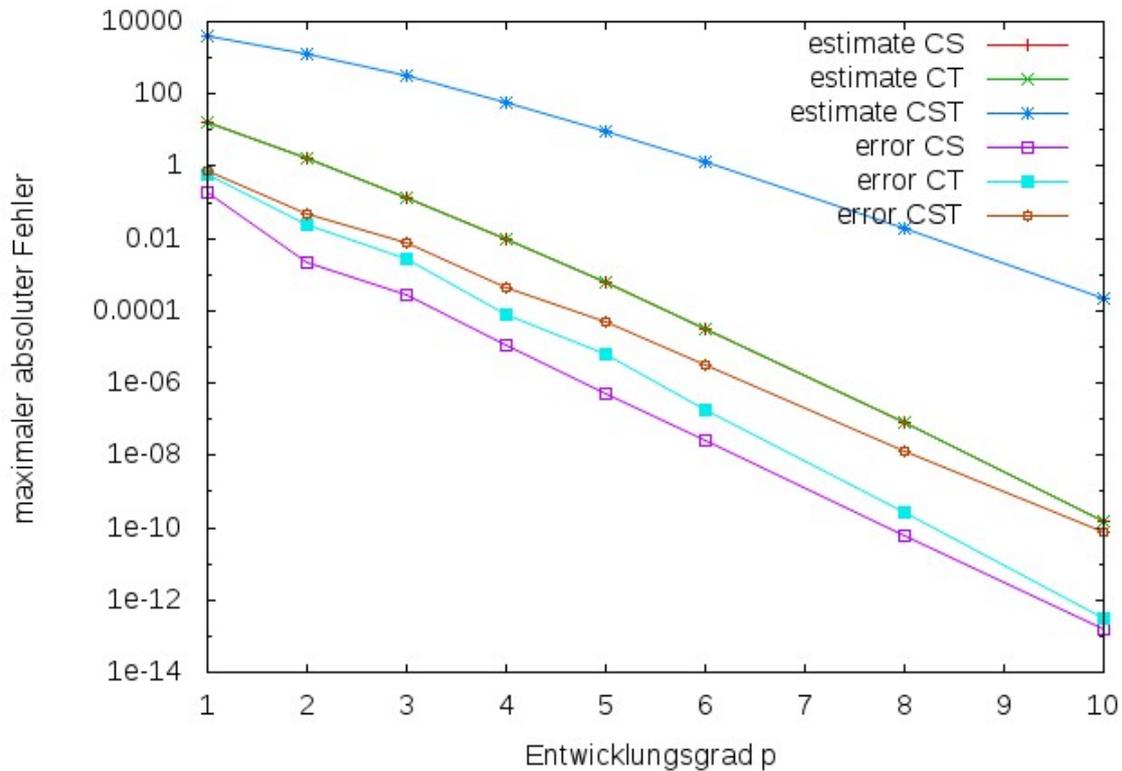


Abbildung 5.5: Vergleich des maximalen absoluten Fehlers der Chebyshev-Entwicklungen mit den theoretischen Abschätzungen, für  $N = M = 100$  Punkte und Parameter  $step = 2$  und  $\delta = 1$ . Die optimalen Werte von  $a$  für die Fehlerabschätzungen sind in Tabelle 5.2 aufgelistet

### 5.2.3 Vernachlässigung weit entfernter Punkte

Wegen des exponentiellen Abklingens der zu approximierenden Funktion lassen sich, wie in Abschnitt 2.3 beschrieben, weit entfernte Punkte bzw. Boxen vernachlässigen. Der dabei entstehende Fehler addiert sich zum Fehler, der durch die Reihenentwicklung entsteht. Der entsprechende Parameter  $n$ , der die Anzahl der zu berücksichtigenden Boxen beschreibt, kann nach der Formel (2.3)

$$|(G - \tilde{G})(t_i)| \leq Q e^{-4h^2 n^2 / \delta},$$

mit  $Q = \sum_{j=1}^N |q_j|$  und halber Kantenlänge  $h$  der Boxen bestimmt werden. Einerseits kann für einen gegebenen Parameter  $n$  aus obiger Formel der maximal zu erwartende Fehler abgeschätzt werden. Andererseits kann aus einer gegebenen Fehlerschranke

$$Q e^{-4h^2 n^2 / \delta} < \varepsilon \quad (5.2)$$

durch Umformung auf

$$n > \sqrt{-\frac{\delta \ln \varepsilon / Q}{4h^2}}$$

berechnet werden, wie groß der Parameter  $n$  mindestens zu wählen ist, sodass diese Fehler-schranke eingehalten wird. Dass die Formel in der Praxis aber schlecht anwendbar ist, zeigt das folgende Beispiel. Hier wurde für  $N = M = 100$  Punkte und  $\delta = 0.01$  eine bivariate Chebyshev-Entwicklung angewandt. Für die Anzahl an Verfeinerungsstufen wurde der Parameter  $step = 3$  gewählt, was auf eine halbe Boxlänge von  $h = 1/16$  führt. Die Gewichte wurden zufällig in  $[0, 1]$  gewählt, woraus sich  $Q = \sum_{j=1}^N |q_j| \approx 55$  ergibt. In Abbildung 5.6 ist

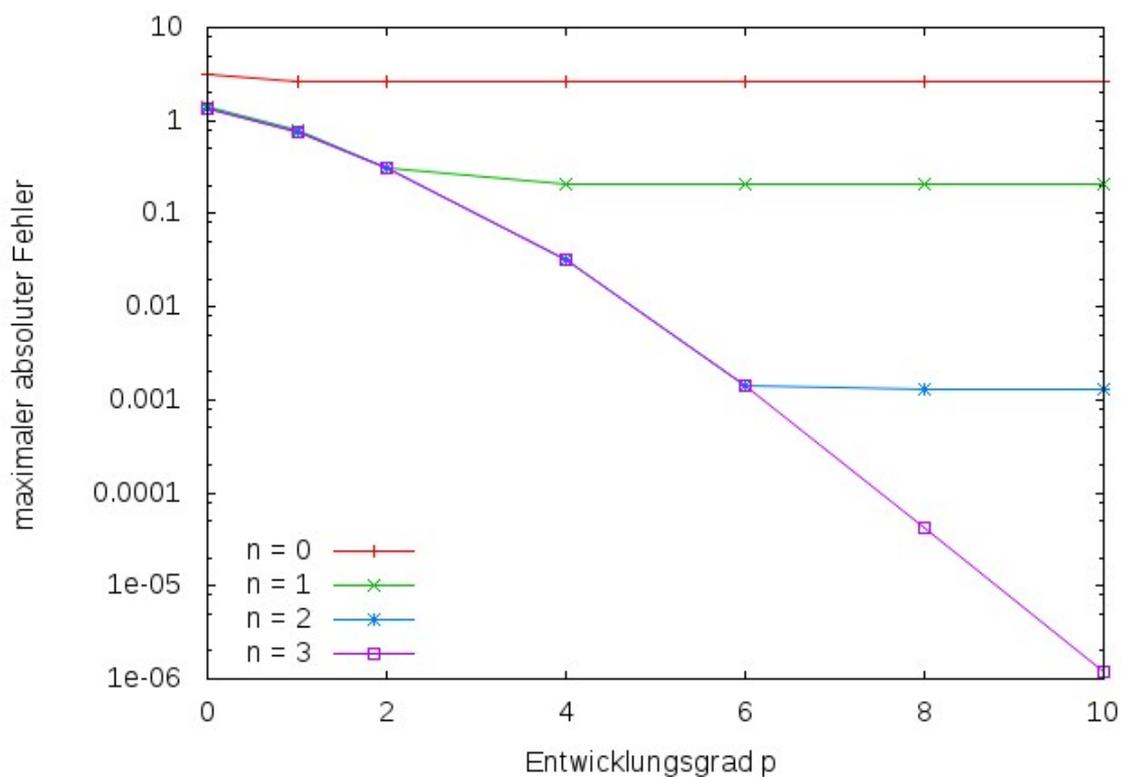


Abbildung 5.6: Vergleich des Fehlers der Chebyshev-Entwicklung bei Vernachlässigung entfernter Punkte. Je größer der Parameter  $n$  ist, also je mehr Boxen inkludiert werden, desto geringer ist der Gesamtfehler, vorausgesetzt der Entwicklungsgrad wird groß genug gewählt.

man den resultierenden absoluten Fehler für verschiedene Werte von  $n$  zu sehen. Es zeigt sich, dass sich zum Beispiel für  $n = 2$  die Vernachlässigung weit entfernter Boxen erst ab einer Entwicklungsordnung von  $p = 8$  auswirkt. Für kleineres  $p$  ist der Fehler durch das Abbrechen der Reihenentwicklung noch größer. Die Werte in Tabelle 5.3 zeigen, dass sich bei

$n$	$\varepsilon$	$n_F$	$\varepsilon_F$
0	2.7	1.39	55
1	0.21	1.89	11.5
2	0.0013	2.61	0.11
3	1.2E-06	3.36	4.3E-05

Tabelle 5.3: Vergleich des aus der Testrechnung resultierenden Fehlers  $\varepsilon$  und der mittels Formel (5.2) aus  $n$  bzw.  $\varepsilon$  berechneten Werte  $n_F$  und  $\varepsilon_F$ .

der Testrechnung mit  $n = 1$  ein Fehler von  $\varepsilon = 0.21$  ergab. Durch Anwendung der Formel ergibt sich aber eine deutlich größere Fehlerschranke von  $\varepsilon_F = 11.5$ . Andererseits ist laut Formel, um einen maximalen Fehler von  $\varepsilon = 0.21$  zu gewährleisten,  $n_F = \lceil 1.89 \rceil = 2$  zu wählen. Tatsächlich genügt aber schon  $n = 1$ . Dass die Formel sowohl den zu erwartenden Fehler, als auch die Anzahl an benötigten Boxen überschätzt, ergibt sich aus der groben Abschätzung der Summe der Gewichte. Die Abschätzung betrachtet den Extremfall, dass alle nicht berücksichtigten Punkte direkt am Rand der äußersten inkludierten Box liegen. In der Praxis liegen die meisten Punkte aber weiter entfernt und liefern somit durch das schnelle Abklingen der Exponentialfunktion einen deutlich geringeren Beitrag zur Lösung. Auf das konkrete Vorgehen zum Abschneiden und zur Wahl des Parameters  $n$  für die weiteren numerischen Tests wird bei den jeweiligen Beispielen genauer eingegangen.

## 5.3 Vergleich der Hermite– und Taylor–Entwicklung mit der Chebyshev–Entwicklung

Nachdem in den vorigen Abschnitten 5.1 und 5.2 die beiden Entwicklungen für sich untersucht wurden, werden nun einige numerische Beispiele zum Vergleich von Fehler und Rechenzeit der beiden Methoden diskutiert.

### 5.3.1 Vergleich des absoluten Fehlers bei fixen Parametern

Als erster Vergleich der beiden Methoden wurde der maximale absolute Fehler verglichen, wobei die Parameter für Skalierungsfaktor  $\delta$ , Anzahl an Verfeinerungsstufen  $step$  und Entwicklungsgrad  $p$  gleich gewählt wurden. In Abbildung 5.7 sind die absoluten Fehler für ein Beispiel mit  $N = M = 1000$  Punkten, die zufällig in  $[0, 1]^2$  verteilt sind, und den Parametern  $\delta = 0.1$  und  $step = 1$  dargestellt. Zu beachten ist dabei, dass aufgrund der unterschiedlichen Abbruchkriterien der Reihen, bei den Chebyshev–Entwicklungen deutlich weniger Terme inkludiert werden. Trotzdem zeigt sich, dass der Fehler der Chebyshev–Entwicklungen um etwa 2 Zehnerpotenzen kleiner ist, als der der Hermite– und Taylor–Entwicklungen. Bei niedrigem Entwicklungsgrad zeigt sich eine Stufenbildung in den Fehlern beider Entwicklungen. Außerdem ist in beiden Fällen die Konvergenz nicht monoton.

Auch die Ordnung der Konvergenz ist sehr ähnlich, scheint eventuell bei den Chebyshev-Entwicklungen etwas besser zu sein. Da bei der Chebyshev-Entwicklung der Fehler deutlich geringer ist, lässt sich erwarten, dass man, um eine gegebene Genauigkeit zu erreichen, bei der Chebyshev-Entwicklung die Entwicklungsordnung um 2-3 Grad niedriger wählen kann. Dass das tatsächlich so ist, wird der nächste numerische Test in Abschnitt 5.3.2 zeigen.

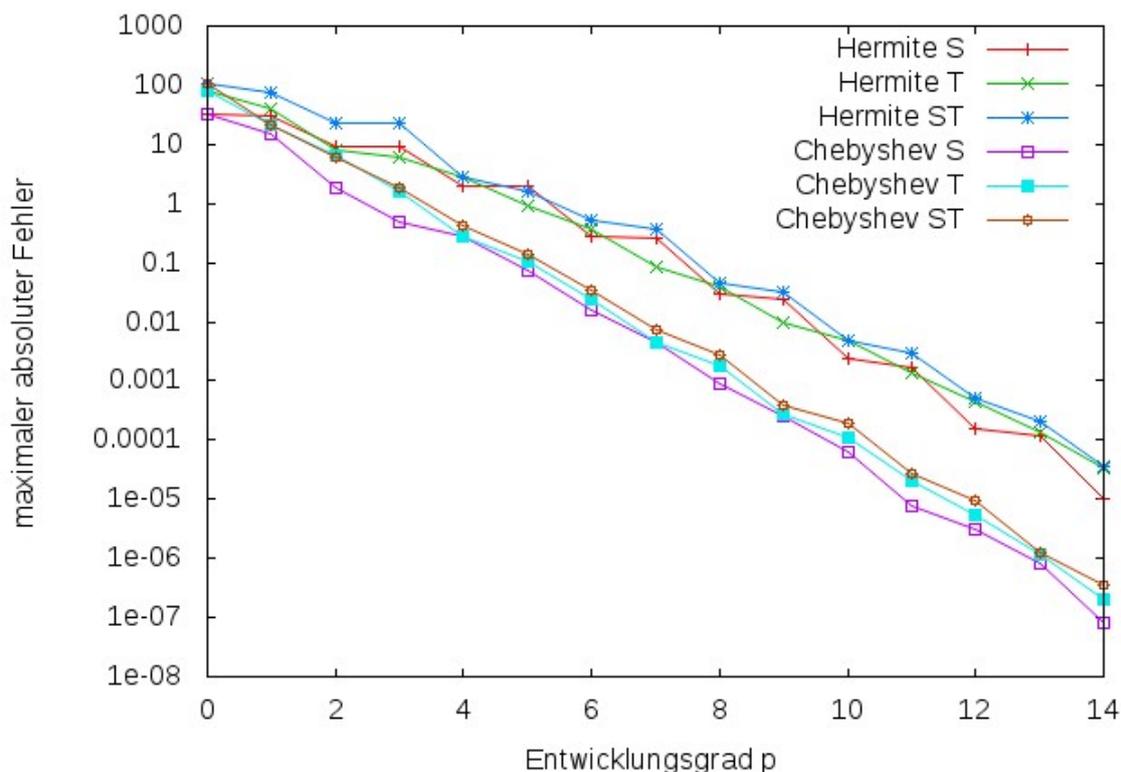


Abbildung 5.7: Vergleich des absoluten Fehlers der Hermite- und Taylor-Entwicklung mit dem Fehler der Chebyshev-Entwicklung für  $N = M = 1000$  Punkte, Skalierungsfaktor  $\delta = 0.1$  und einmaliger Verfeinerung ( $step = 1$ ).

In Abbildung 5.8 ist ein weiteres Beispiel mit  $N = M = 1000$  Punkten, Skalierungsfaktor  $\delta = 0.01$  und dreifacher Verfeinerung ( $step = 3$ ) zu sehen. Es zeigt sich ein ähnliches Verhalten wie in dem Beispiel zuvor. Die Stufenbildung geht bei beiden Methoden deutlich zurück.

### 5.3.2 Vergleich der Rechenzeiten bei fixen Parametern

Neben dem Vergleich des absoluten Fehlers lässt sich bei fixen Parametern nun auch die benötigte Rechenzeit vergleichen. Hierzu wurde eine gewünschte relative Genauigkeit von  $\varepsilon = 10^{-5}$  vorgegeben, und die Parameter  $\delta = 0.1$  und  $step = 1$  fixiert. Bei beiden Methoden wurde die bivariate Entwicklung angewandt. Der Entwicklungsgrad  $p$  wurde dann so

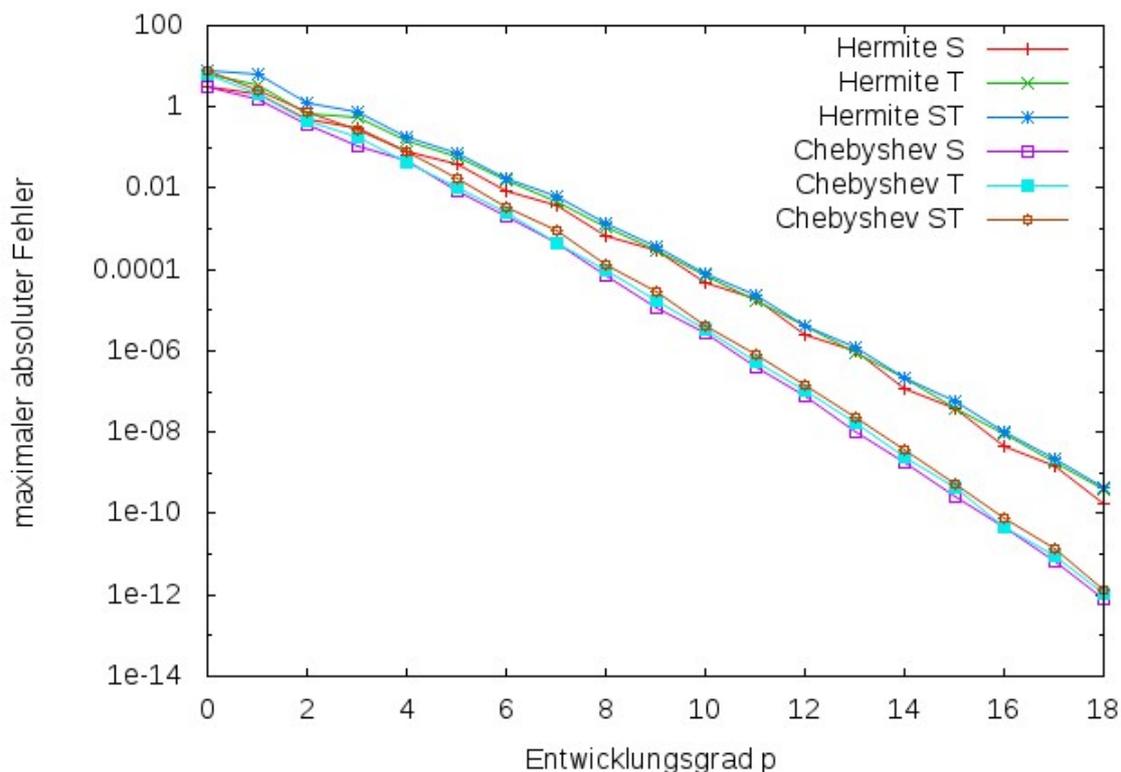


Abbildung 5.8: Vergleich des absoluten Fehlers der Hermite- und Taylor-Entwicklung mit dem Fehler der Chebyshev-Entwicklung für  $N = M = 1000$  Punkte, Skalierungsfaktor  $\delta = 0.01$  und dreifache Verfeinerung ( $step = 3$ ).

gewählt, dass die gewünschte Genauigkeit erreicht wird. Als Parameter ergaben sich dabei  $p = 12$  bei der Hermite- und Taylor-Entwicklung, wobei sich dadurch ein relativer Fehler von  $8 \times 10^{-6}$  ergibt. Bei der Chebyshev-Entwicklung führt die Wahl von  $p = 9$  auf einen relativen Fehler von  $4 \times 10^{-6}$ . Aufgrund der guten Konvergenzrate von fast einer Zehnerpotenz pro Entwicklungsordnung war es hier nicht möglich einen geringeren Unterschied der Fehler zu erreichen. Es zeigt sich aber wie im vorigen Abschnitt ersichtlich, dass die Chebyshev-Entwicklung eine geringere Entwicklungsordnung benötigt.

In Abbildung 5.9 ist in einem doppelt logarithmischen Plot die Rechenzeit in Sekunden für eine steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten abgebildet. Für die Bestimmung der Rechenzeit wurde der Mittelwert über 10 Rechnungen gebildet. Es zeigt sich nun, dass die Chebyshev-Entwicklung bei kleineren Punktanzahlen noch eine höhere Rechenzeit benötigt als die Hermite- und Taylor-Entwicklung. Das liegt an der, für die Chebyshev-Entwicklung notwendigen, numerischen Integration. Als Parameter wurde hier  $\rho = p$  gewählt. Da die numerische Integration aber nur bei den Box-Box Interaktionen auftritt, und die Anzahl der Boxen konstant ist, wird der Einfluss mit steigender Anzahl an Punkten geringer. Somit ergibt sich, dass die Chebyshev-Entwicklung bei einer größeren Anzahl an Punkten

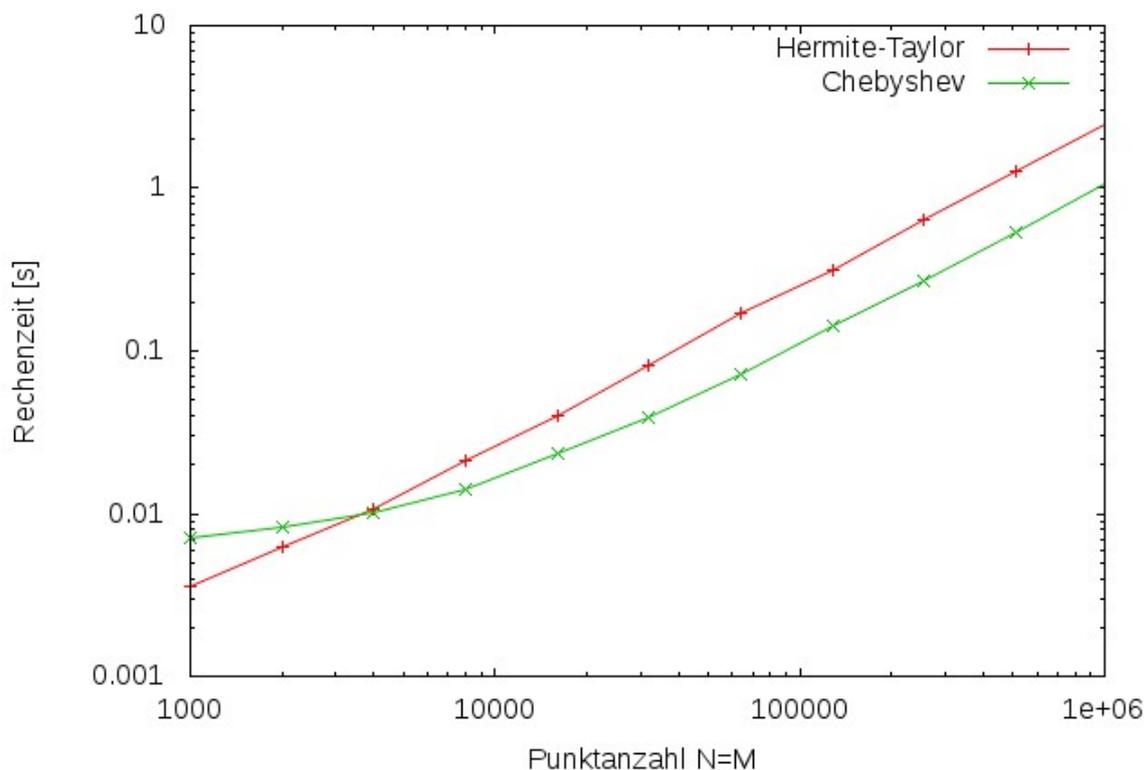


Abbildung 5.9: Vergleich der Rechenzeiten der Hermite- und Taylor-Entwicklung und der bivariaten Chebyshev-Entwicklung bei vorgegebenem relativen Fehler  $\varepsilon = 10^{-5}$ .

wegen des niedrigeren Entwicklungsgrades deutlich schneller als die Hermite- und Taylor-Entwicklung ist.

### 5.3.3 Rechenzeitvergleich mit direkter Auswertung

Bevor wir die beiden Reihenentwicklungen mit optimierten Parametern vergleichen, betrachten wir zuerst einen Vergleich der Rechenzeit mit der direkten Auswertung der diskreten Gauß-Transformation. Für die schnelle Gauß-Transformation wurde eine Hermite- und Taylor-Entwicklung mit Entwicklungsordnung  $p = 6$  gemacht. Die Punkte wurden zufällig auf  $[0, 1]^2$  verteilt und es wurde nicht verfeinert ( $step = 0$ ). Dabei ergibt sich nun ein maximaler relativer Fehler von  $10^{-3}$  für die Approximation der diskreten Gauß-Transformation. Die resultierenden Rechenzeiten sind in Abbildung 5.10 zu sehen. Aus den Werten in Tabelle 5.4 ist ersichtlich, dass sich bei der direkten Berechnung die Rechenzeit bei Verdopplung von  $N$  und  $M$  vervierfacht. Bei der schnellen Gauß-Transformation führt eine Verdopplung der Punktzahlen auf eine Verdopplung der Rechenzeit, was bedeutet, dass der Aufwand in der Anzahl der Punkte linear ist. Es zeigt sich außerdem die deutliche

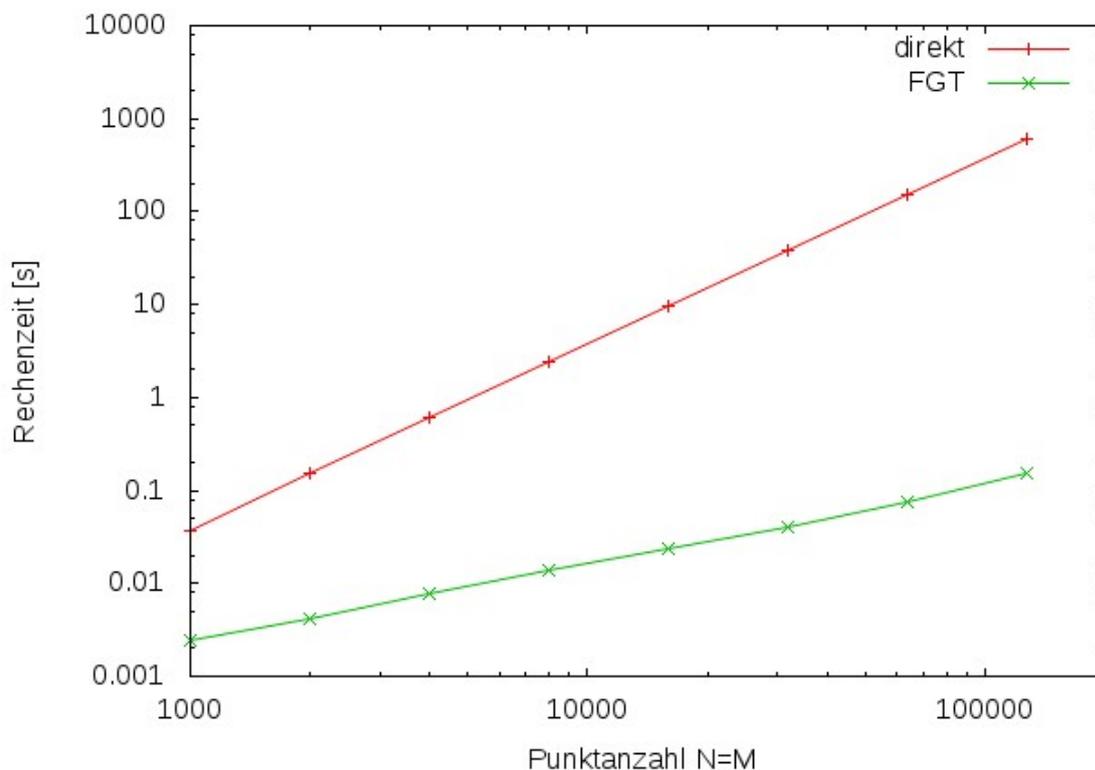


Abbildung 5.10: Vergleich der Rechenzeiten von direkter Berechnung der diskreten Gauß-Transformation mit der Approximation mittels schneller Gauß-Transformation. Für die FGT wurde die Hermite- und Taylor-Entwicklung mit Parametern  $p = 6$  und  $step = 0$  gewählt, was zu einem relativen Fehler von  $10^{-3}$  führt.

Reduktion der Rechenzeit, da bei  $N = M = 128000$  Punkten für die direkte Berechnung bereits über 10 Minuten benötigt werden, wohingegen die schnelle Gauß-Transformation nur etwa 0.15 Sekunden benötigt.

### 5.3.4 Vergleich der Rechenzeiten bei optimierten Parametern

In diesem Abschnitt werden nun die Rechenzeiten der beiden Methoden mit optimierten Parametern verglichen. Dazu werden zunächst ein Skalierungsfaktor  $\delta$  und eine gewünschte relative Genauigkeit  $\varepsilon$  gewählt. Dann werden für beide Methoden die Anzahl an Verfeinerungsstufen  $step$  und der Entwicklungsgrad  $p$  so gewählt, dass die gewünschte Genauigkeit erreicht wird. Da verschiedene Kombinationen von  $step$  und  $p$  die gewünschte Genauigkeit liefern können, wird ein Vergleich der Rechenzeiten gemacht, und die schnellste Parameterkombination verwendet. Außerdem muss der Parameter  $n$  für das Vernachlässigen weit entfernter Boxen so gewählt werden, dass der daraus resultierende Fehler nicht größer als

$N = M$	direkt	FGT
1000	0.037 638	0.002 389
2000	0.150 154	0.004 136
4000	0.599 818	0.007 628
8000	2.393	0.013 621
16000	9.782 33	0.023 989
32000	38.493	0.040 212
64000	153.189	0.075 031
128000	614.205	0.151 894

Tabelle 5.4: Rechenzeit für die direkte Berechnung der diskreten Gauß-Transformation und bei Approximation mittels schneller Gauß-Transformation mit einem maximalen relativen Fehler von  $10^{-3}$ .

der Fehler der durch das Abbrechen der Reihenentwicklungen entsteht ist. Für die Kombination der einzelnen Reihenentwicklungen (nur in Quellbox, nur in Zielbox oder in Quell- und Zielbox) müssen die Schranken  $N_F$  und  $M_L$  bestimmt werden. Für die so bestimmten Parameter wird dann für eine steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten die Rechenzeit der beiden Methode miteinander verglichen. Der Parameter  $\rho$  für die numerische Integration zur Berechnung der Chebyshev-Entwicklungskoeffizienten wurde für alle folgenden Beispiele auf  $\rho = p$  gesetzt.

**Test 1:**  $\delta = 1$ ,  $\varepsilon = 10^{-3}$

Für den ersten numerischen Test wurde der Skalierungsfaktor  $\delta = 1$  und eine gewünschte relative Genauigkeit von  $\varepsilon = 10^{-3}$  gewählt. Die sich für die steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten ergebenden Parameterkombinationen sind in Tabelle 5.5 aufgelistet. Es zeigt sich dabei, dass für eine Chebyshev-Entwicklung keine Unterteilung der Punktemenge am schnellsten ist. Das liegt daran, dass bei dieser Methode die notwendige numerische Integration sich negativ auf die Rechenzeit auswirkt. Bei einer bivariaten Entwicklung tritt, wie aus Formel (4.16) ersichtlich, die numerische Integration bei den Box-Box Interaktionen zur Berechnung der Entwicklungskoeffizienten in den Zielboxen auf. Das bedeutet, je weniger Boxen es gibt, desto seltener ist eine numerische Integration nötig und daher ist  $step = 0$  am schnellsten, auch wenn dadurch die Entwicklungsordnung etwas höher ist.

Für die Anzahl  $n$  an zu inkludierenden Boxen wird die Formel aus Abschnitt 2.3 verwendet. Da nun, statt des absoluten, der relative Fehler gegeben ist, wird Formel (2.3) in der Form

$$\left| \frac{G(t_i) - \tilde{G}(t_i)}{G(t_i)} \right| \leq \left| \frac{G(t_i) - \tilde{G}(t_i)}{G_{min}} \right| \leq \frac{Q}{G_{min}} e^{-4h^2 n^2 / \delta} \stackrel{!}{<} \varepsilon \quad (5.3)$$

angewandt. Hier ist  $G_{min}$  das Minimum der Funktionswerte über die Zielpunkte

$$G_{min} = \min_{i=1, M} \{G(t_i)\}.$$

$N = M$	$step_H$	$p_H$	$n_H$	$step_C$	$p_C$	$n_C$
1000	1	4	6	0	4	3
2000	1	4	6	0	4	3
4000	1	4	6	0	4	3
8000	1	4	6	0	4	3
16000	1	4	6	0	4	3
32000	2	3	11	0	4	3
64000	2	3	11	0	4	3
128000	3	2	22	0	4	3
256000	3	2	22	0	4	3

Tabelle 5.5: Optimierte Parameter  $step$  und  $p$  der beiden Methoden für Test 1 mit den Parametern  $\delta = 1$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Außerdem ist der mittels Formel (5.3) berechnete Wert  $n$  für das Vernachlässigen weit entfernter Boxen aufgelistet.

Da für große Anzahlen an Quell- und Zielpunkten die exakte Berechnung der diskreten Gauß-Transformation sehr zeitaufwendig wird, wurden für die Berechnung des Minimums  $M = 1000$  fixe Zielpunkte gewählt. Die so berechneten Werte von  $n$  sind in Tabelle 5.5 aufgelistet. Da das Verhältnis  $\frac{Q}{G_{min}}$  für alle Punktzahlen annähernd gleich ist, und sowohl  $\delta$  als auch  $\varepsilon$  fix sind, hängt der Wert von  $n$  nur von der gewählten Verfeinerungsstufe  $step$  bzw. der sich daraus ergebenden halben Kantenlänge  $h$  der Boxen ab. Es zeigt sich dabei, dass die Anzahl  $n$  deutlich größer als die tatsächliche Anzahl an Boxen ist. Das liegt an dem relativ großen Skalierungsfaktor  $\delta = 1$ , wegen dem die Gauß-Funktion nur langsam abklingt, und daher auch weit entfernte Punkte einen bedeutenden Beitrag zur Lösung haben können. Somit ist in diesem Fall die Formel unbrauchbar und es wurde in diesem Beispiel auf die Vernachlässigung weit entfernter Boxen verzichtet.

Für die Bestimmung der optimalen Parameter  $N_F$  und  $M_L$  wurden grobe numerische Tests durchgeführt. Dazu wurden eine Quellbox und eine Zielbox fixiert und für steigende Anzahlen an Quell- und Zielpunkten die Rechenzeiten der verschiedenen Entwicklungen verglichen. Diese vereinfachte Situation bildet den echten Rechenaufwand aber nur unzureichend ab. Denn es wird nicht berücksichtigt, dass eine einmal berechnete Quellboxentwicklung in mehreren Zielboxen verwendet werden kann und dafür nicht jedes mal neu berechnet werden muss. Genau so muss eine Zielboxentwicklung nur am Ende des Algorithmus einmal pro Box ausgewertet werden. Somit lieferten die so erhaltenen Schranken keinen Aufschluss über die optimale Wahl dieser Parameter. Da eine Reihenentwicklung aber nur dann Sinn macht, wenn die Anzahl an Punkten in der Box größer als die Anzahl an Entwicklungstermen ist, wurden für diesen Test  $N_F = M_L = (p + 1)^2$  für die Hermite- und Taylor-Entwicklungen und  $N_F = M_L = (p + 1) \cdot (p + 2)/2$  gewählt. Es zeigte sich dann aber, dass wegen der geringen Anzahl an Boxen und des relativ niedrigen Entwicklungsgrades  $p$  die Anzahl an Punkten pro Box so groß ist, dass in keinem Fall eine direkte Auswertung erfolgte.

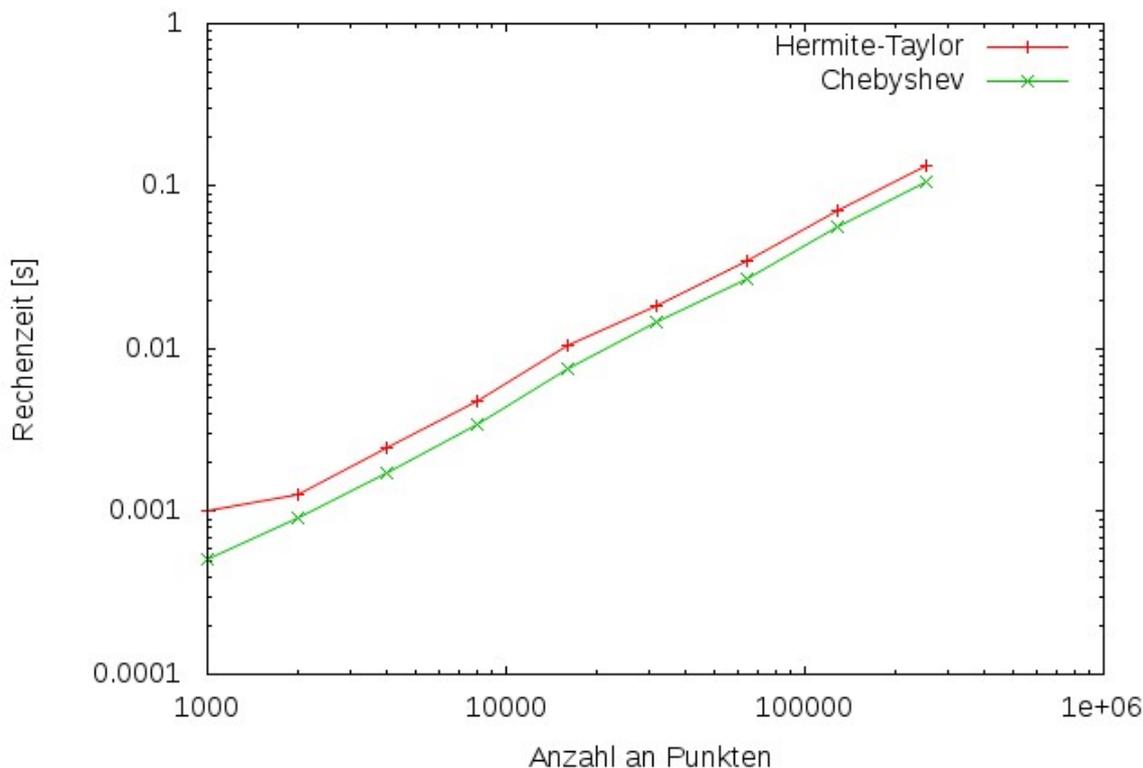


Abbildung 5.11: Vergleich der Rechenzeit der Hermite- und Taylor-Entwicklung und der Chebyshev-Entwicklung für eine steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten mit  $\delta = 1$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$  und optimierten Parametern  $step$  und  $p$ .

In Abbildung 5.11 sind die Ergebnisse des Zeitvergleichs zu sehen. Es zeigt sich, dass die Chebyshev-Entwicklung etwas schneller als die Hermite- und Taylor-Entwicklung ist. Das liegt an den bei der Hermite- und Taylor-Entwicklung höheren Verfeinerungsstufen, aus denen sich ein zusätzlicher Aufwand für Box-Box-Interaktionen ergibt, die bei der Chebyshev-Entwicklung ohne Verfeinerung nicht nötig ist. Der lineare Anstieg der Rechenzeit mit steigender Anzahl an Punkten ist bei beiden Methoden ersichtlich.

**Test 2:**  $\delta = 0.01$ ,  $\varepsilon = 10^{-3}$

Bei dem zweiten numerischen Test wurde der Skalierungsfaktor mit  $\delta = 0.01$  deutlich kleiner gewählt. Die gewünschte relative Genauigkeit ist wieder  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Die sich nun ergebenden optimalen Parameterkombinationen sind in Tabelle 5.6 zu sehen. Wegen des deutlich kleineren Skalierungsfaktors ist bei beiden Methoden eine höhere Verfeinerungsstufe, sowie ein höherer Entwicklungsgrad notwendig.

Auch bei diesem Beispiel wurde Formel (5.3) zur Berechnung der Anzahl  $n$  an zu inkludierenden Boxen verwendet. Die so erhaltenen Werte sind ebenfalls in Tabelle 5.6 aufgelistet. Diese Werte sind, im Gegensatz zum vorigen Beispiel brauchbar. Das liegt an dem

$N = M$	$step_H$	$p_H$	$n_H$	$step_C$	$p_C$	$n_C$
1000	3	7	3	2	9	2
2000	3	7	3	2	9	2
4000	3	7	3	2	9	2
8000	3	7	3	2	9	2
16000	3	6	3	2	9	2
32000	3	6	3	2	8	2
64000	3	6	3	2	8	2
128000	3	6	3	2	7	2

Tabelle 5.6: Optimale Parameter der beiden Methoden für Test 2 mit den Parametern  $\delta = 0.01$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Außerdem ist der mittels Formel (5.3) berechnete Wert  $n$  für das Vernachlässigen weit entfernter Boxen aufgelistet.

nun deutlich kleiner gewählten Skalierungsfaktor  $\delta$ . Einerseits sind, wie bereits erwähnt, die Verfeinerungsstufen höher, andererseits haben, wegen des schnelleren exponentiellen Abklingens, weiter entfernte Punkte einen geringeren Einfluss auf die Lösung.

Die Parameter  $N_F$  und  $M_L$  wurden zunächst wie im Beispiel zuvor gewählt. Hier zeigte sich aber genau ein umgekehrtes Verhalten, wiederum aufgrund der höheren Verfeinerungsstufen. Nun war für niedrige  $N$  und  $M$  die Anzahl an Punkten pro Box so gering, dass immer direkt ausgewertet wurde. Wie in Abbildung 5.12 ersichtlich, wirkt sich das negativ auf die Rechenzeit aus, da wie beim vorigen Beispiel beschrieben, nicht berücksichtigt wird, dass eine einmal berechnete lokale Entwicklung auch öfter verwendet werden kann, und daher effizienter als eine direkte Auswertung sein kann.

Für das abschließende Beispiel wurde daher  $N_F = M_L = 0$  gewählt, womit keine direkte Auswertung mehr auftritt und nur mehr die bivariaten Entwicklungen angewandt werden. Die endgültigen Rechenzeiten zu diesem Beispiel sind in Abbildung 5.13 dargestellt. Hier ist nun die Hermite- und Taylor-Entwicklung schneller. Das liegt an den, wegen der numerischen Integration, sehr teuren Box-Box-Interaktionen bei der Chebyshev-Entwicklung. Da die Anzahl an Boxen aber konstant ist, wird der Unterschied bei steigender Anzahl an Punkten deutlich geringer.

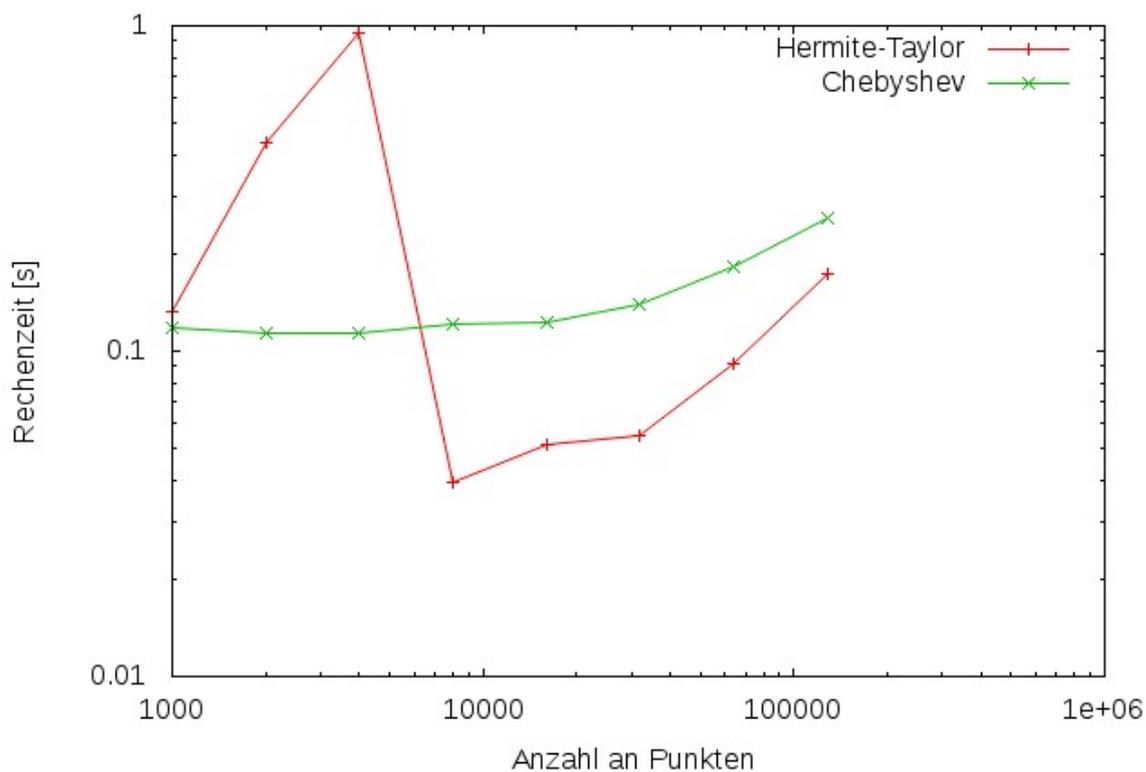


Abbildung 5.12: Vergleich der Rechenzeit der Hermite- und Taylor-Entwicklungen und der Chebyshev-Entwicklung für eine steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten mit  $\delta = 0.01$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$  und optimierten Parametern  $step$  und  $p$  und aktiven Schranken  $N_F$  und  $M_L$ .

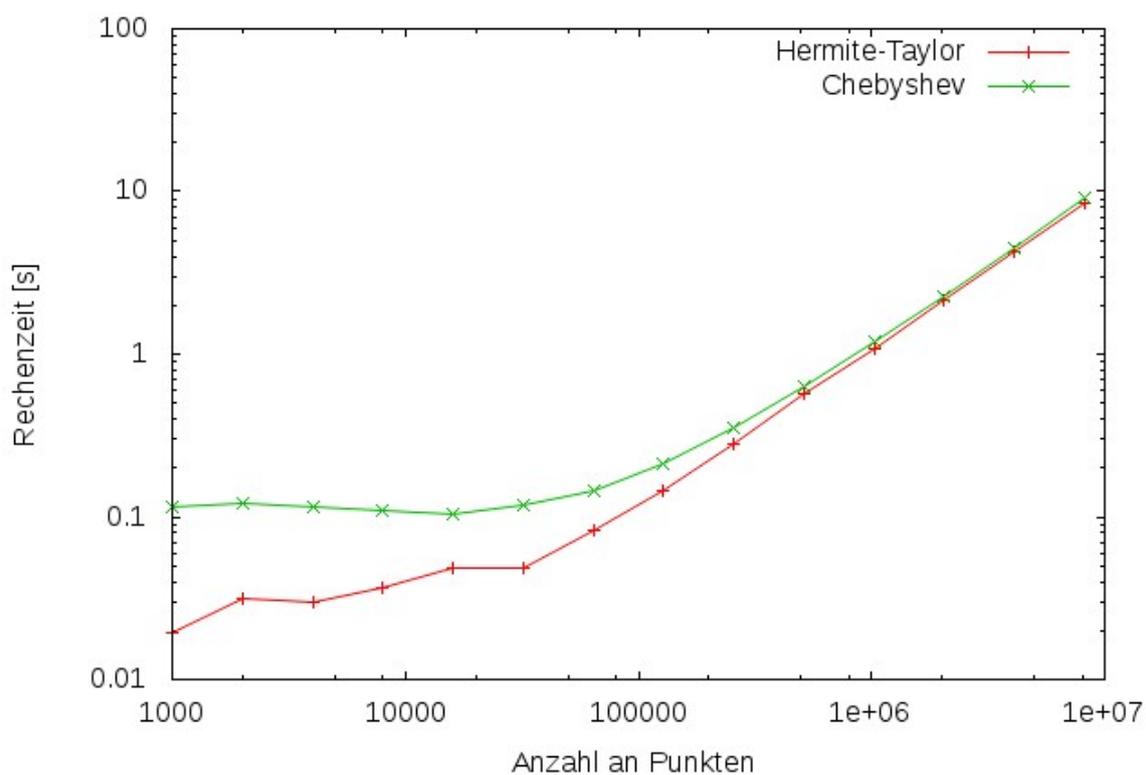


Abbildung 5.13: Vergleich der Rechenzeit der Hermite- und Taylor-Entwicklungen und der Chebyshev-Entwicklung für eine steigende Anzahl an Quell- und Zielpunkten mit  $\delta = 0.01$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$  und optimierten Parametern  $step$  und  $p$ .



## 6 Zusammenfassung

Ziel dieser Arbeit war der Vergleich verschiedener Varianten der schnellen Gauß-Transformation. Im wesentlichen wurde die schnelle Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklung [7] und andererseits mit Chebyshev-Entwicklung [19] analysiert und miteinander verglichen.

In den Kapiteln 3 und 4 wurden zunächst einerseits die schnelle Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklung und andererseits die schnelle Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklung theoretisch untersucht. Es wurden Fehlerabschätzungen für den absoluten Fehler dargestellt, und die Komplexität der resultierenden Algorithmen angegeben. Bei den Fehlerabschätzungen zeigte sich eine etwas bessere Konvergenzordnung bei der Chebyshev-Entwicklung. Allerdings ist bei dieser auch eine numerische Integration notwendig, die sich negativ auf die Rechenzeit auswirkt.

Bei den numerischen Tests in Kapitel 5 wurden zunächst die beiden Methoden einzeln untersucht, um die theoretischen Fehlerabschätzungen zu überprüfen. Zusätzlich zu den bivariaten Entwicklungen wurden hier auch auf die Entwicklungen nur für Quell- oder Zielbox eingegangen. Bei der schnellen Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklungen zeigte sich eine gute Übereinstimmung des Fehlers mit den theoretischen Schranken. Bei der schnellen Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklungen zeigte sich, dass die Fehlerabschätzungen zwar den asymptotischen Verlauf des Fehler gut beschreiben, den tatsächlichen Fehler aber weit überschätzen. Außerdem zeigte sich, dass bei einer Chebyshev-Entwicklung die Entwicklungsordnung  $p$ , die nötig ist, um eine gewisse Genauigkeit zu erreichen, niedriger ist als bei der Hermite- und Taylor-Entwicklung.

Für die bei der Chebyshev-Entwicklung notwendige numerische Integration für die Berechnung der Entwicklungskoeffizienten wurden auch numerische Tests durchgeführt, um eine geeignete Wahl des Parameters  $q$  für die Anzahl an Integrationspunkten zu erreichen. Hier zeigte sich, dass durch die Wahl  $q = p$  der Integrationsfehler im Vergleich zum Fehler durch Abbruch der Reihenentwicklung vernachlässigbar klein wird. Die Ergebnisse lassen allerdings vermuten, dass bei einer steigenden Entwicklungsordnung  $p$  der Parameter  $q$  durchaus auch niedriger als  $p$  gewählt werden kann.

Für den Vergleich der Rechenzeiten der beiden Methoden wurden zunächst die Parameter für die Entwicklungsordnung  $p$  sowie für die Anzahl an Verfeinerungsstufen *step* optimiert. Bei den Rechenzeiten zeigte sich dann, dass der zusätzliche Rechenaufwand für die numerische Integration bei der Chebyshev-Entwicklung durchaus durch die niedrigere Entwicklungsordnung kompensiert werden kann. Allerdings nur, wenn der Skalierungsfaktor groß genug ist, da bei einem sehr kleinen Skalierungsfaktor eine Verfeinerung des Gebietes auf jeden Fall notwendig wird, wodurch der Einfluss der numerischen Integration bei den Box-Box-Interaktionen steigt. Hier ergibt sich dann ein deutlicher Overhead bei

der Chebyshev-Entwicklung, vor allem bei einer geringen Anzahl an Punkten. Allerdings bleibt bei einer steigenden Anzahl an Quell- und Zielpunkten die einmal gewählte Verfeinerungsstufe gleich, womit der Zusatzaufwand für die numerische Integration nicht ansteigt. Somit wird dieser Zusatzaufwand deutlich geringer, je größer die Anzahl an Quell- und Zielpunkten ist.

Bei der Anwendung der Formel für die Vernachlässigung weit entfernter Boxen zeigte sich, dass die Formel nur brauchbare Werte liefert, wenn der Skalierungsfaktor  $\delta$  klein genug ist.

Neben den rein bivariaten Entwicklungen sollte auch eine Kombination mit den Entwicklungen nur für Quell- oder Zielboxen gemacht werden. Hier ergaben sich aber Schwierigkeiten bei der Bestimmung der Schranken. Die vereinfachten numerischen Beispiele, deren Rechenzeiten zur Ermittlung der Schranken verwendet wurden, spiegelten den tatsächlichen Rechenaufwand nur unzureichend wider. Die so erhaltenen Werte waren für die numerischen Tests nicht brauchbar. Somit wurden bei den Tests nur die bivariaten Entwicklungen miteinander verglichen. Hier wären numerische Tests die insbesondere auch die Anzahl an Interaktionsboxen berücksichtigen notwendig, um geeignete Werte für die Schranken zu finden.

Insgesamt zeigte sich aber, dass sowohl die schnelle Gauß-Transformation mit Hermite- und Taylor-Entwicklungen als auch die schnelle Gauß-Transformation mit Chebyshev-Entwicklungen um ein Vielfaches schneller sind als die direkte Berechnung der diskreten Gauß-Transformation.

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. U.S. Govt. Print. Off., Washington, DC, 1964.
- [2] M. Aigner. *Diskrete Mathematik*. Vieweg, Berlin, 2006.
- [3] R. Brown. Layer potentials and boundary value problems for the heat equation on Lipschitz cylinders. PhD thesis, University of Minnesota, Minneapolis, MN, 1987.
- [4] G. H. Cottet, S. Mas-Gallic, and P. A. Raviart. *Vortex methods for the incompressible Euler and Navier–Stokes equations*. Proc. Workshop on Computational Fluid Dynamics and Reacting Gas Flows, Institute for Mathematics and Its Applications, Minneapolis, MN, September 1986.
- [5] A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, and F. Tricomi. *Higher Transcendental Functions*, volume II. McGraw-Hill, New York, 1953.
- [6] S. Geman and C. Hwang. Nonparametric maximum likelihood estimation by the method of sieves. *Ann. Statist.*, 10:401–414, 1982.
- [7] L. Greengard and J. Strain. The Fast Gauss Transform. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12(1):79–94, 1991.
- [8] E. Hille. A class of reciprocal functions. *Ann. Math.*, 27:427–464, 1926.
- [9] G. Kratochwill. Der Algorithmus der Schnellen Gauß–Transformation. Masterprojekt, Institut für Numerische Mathematik, Technische Universität Graz, 2016.
- [10] N. Lerner. Wick-Wigner functions and tomographic methods. *SIAM J. Math. Anal.*, 21:1084–1092, 1990.
- [11] J.C. Mason and C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials*. Chapman and Hall/CRC, 2002.
- [12] M. Messner. A Fast Multipole Galerkin Boundary Element Method for the Transient Heat Equation. PhD thesis, Institut für Baumechanik, Technische Universität Graz, 2014.
- [13] M. Messner, J. Tausch, and M. Schanz. Fast Galerkin Method for Parabolic Space-Time Boundary Integral Equations. *J. Comput. Phys.*, 258:15–30, 2014.
- [14] W. Rudin. *Real and Complex Analysis*. McGraw-Hill, New York, 1970.
- [15] R. Schaback and H. Wendland. *Numerische Mathematik*. Springer, 2004.
- [16] J. Strain. The Fast Gauss Transform With Variable Scales. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12(5):1131–1139, 1991.

- [17] J. Strain. Fast Adaptive Methods For The Free-Space Heat Equation. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 15(1):185–206, 1994.
- [18] J. Tausch. Fast Nyström Methods for Parabolic Boundary Integral Equations. In U. Langer, M. Schanz, O. Steinbach, and W. L. Wendland, editors, *Fast Boundary Element Methods in Engineering and Industrial Applications*, volume 63 of *Lecture Notes in Applied and Computational Mechanics*, pages 185–219. Springer, 2011.
- [19] J. Tausch and A. Weckiewicz. Multidimensional Fast Gauss Transforms By Chebyshev Expansions. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 31(5):3547–3565, 2009.
- [20] P. R. Wallace. *Mathematical Analysis of Physical Problems*. Dover, New York, 1984.
- [21] H. Wendland. *Scattered Data Approximation*. Number 17 in Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics, Cambridge University Press, 2005.

## EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZ-online hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

---

Datum

---

Unterschrift