

Inhaltsverzeichnis

I Grundlagen

1	Modelle	3
1.1	Original und Modell	3
1.2	Modellsubjekt und Modell	5
1.2.1	Verwendungszweck von Modellen	5
1.3	Modellsubjekt und Original	6
1.4	Modellbildung	7
1.4.1	Spezifikation des Problems	7
1.4.2	Aufstellung eines Strukturkonzeptes	8
1.4.3	Auswahl des Modelltyps (Modellentwurf)	8
1.4.4	Festlegung der Parameterwerte	10
1.4.5	Testen, Validieren	10
2	Grundbegriffe der Numerik	12
2.1	Vom Anwendungsproblem zur numerischen Lösung	12
2.1.1	Fallstudie: Pendel	13
2.1.2	Quantitative und qualitative Fragestellungen	17
2.2	Numerische Aufgaben	19
2.2.1	Numerische Probleme	22
2.2.2	Kategorien numerischer Probleme	25
2.2.3	Genauigkeit der Ergebnisse	26
2.3	Fehlerbegriffe der Numerik	32
2.3.1	Modellfehler	33
2.3.2	Datenfehler	33
2.3.3	Verfahrensfehler	34
2.3.4	Rundungsfehler (Rechenfehler)	38
2.3.5	Fehlerhierarchie	41
2.4	Kondition mathematischer Probleme	43
2.4.1	Ungestörtes und gestörtes Problem	43
2.4.2	Absolute Konditionszahl	44
2.4.3	Relative Konditionszahl	44
2.4.4	Einschränkung der Problemklasse	46
2.4.5	Konditionszahlen durch Differentiation	47
2.4.6	Fallstudie: Quadratische Gleichung	48
2.4.7	Schlecht konditionierte Probleme	49
2.4.8	Inkorrekt gestellte Probleme	50
2.5	Kondition der Anwendungsprobleme	51
2.6	Mathematische Grundlagen der Konditionsabschätzung	53
2.6.1	Kondition direkter mathematischer Probleme	53
2.6.2	Kondition inverser mathematischer Probleme	59

2.7	Validierung numerischer Berechnungen	63
2.7.1	Unsicherheit numerischer Berechnungen	63
2.7.2	Modell-Validierung	64
2.7.3	Sensitivitätsanalyse und Fehlerschätzung	65
2.7.4	Softwarefehler	71

II Lösen numerischer Probleme am Computer

3	Computer für die Numerische Datenverarbeitung	77
3.1	Prozessoren	80
3.1.1	Pipeline-Prinzip	81
3.1.2	Superpipeline-Architektur	84
3.1.3	Superskalar-Architekturen	85
3.1.4	Vektorprozessoren	87
3.2	Speicher	88
3.2.1	Speicherhierarchie	89
3.2.2	Adressierungsarten	91
3.2.3	Register	93
3.2.4	Cache-Speicher	94
3.2.5	Virtueller Speicher	99
3.2.6	Speicherverschränkung	100
3.3	Quantifizierung der Leistung	101
3.3.1	Der Begriff „Leistung“	102
3.3.2	Leistungsfaktor Zeit	103
3.4	Analytische Leistungsbewertung	105
3.4.1	Maximale Gleitpunktleistung	105
3.4.2	Instruktionenleistung	107
3.4.3	Leistung von Vektorprozessoren	109
3.4.4	Leistungseinfluß des Speichers	111
3.5	Empirische Leistungsbewertung	113
3.5.1	Temporale Leistung	113
3.5.2	Empirische Instruktionenleistung	113
3.5.3	Empirische Gleitpunktleistung	115
3.5.4	Empirische Leistung von Vektorprozessoren	116
4	Numerische Daten und Operationen	119
4.1	Daten der Mathematik	119
4.1.1	Elementare mathematische Daten	119
4.1.2	Algebraische Daten	119
4.1.3	Analytische Daten	120
4.2	Numerische Daten am Computer	121
4.2.1	Elementare numerische Daten	122
4.2.2	Algebraische Daten	123
4.2.3	Analytische Daten	123
4.2.4	Numerische Datentypen	124

4.3	Operationen mit numerischen Daten	124
4.3.1	Arithmetische Operationen	125
4.3.2	Algebraische Operationen	126
4.3.3	Feldverarbeitung in Fortran 90	127
4.3.4	Analytische Operationen	129
4.4	Zahlensysteme am Computer	131
4.4.1	INTEGER-Zahlensysteme	131
4.4.2	Festpunkt-Zahlensysteme	134
4.4.3	Gleitpunkt-Zahlensysteme	136
4.5	Struktur von Gleitpunkt-Zahlensystemen	140
4.5.1	Anzahl der Gleitpunktzahlen	140
4.5.2	Größe und kleinste Gleitpunktzahl	141
4.5.3	Absolute Abstände der Gleitpunktzahlen	142
4.5.4	Relative Abstände der Gleitpunktzahlen	143
4.5.5	Fallstudie: $\mathbb{IF}(10, 6, -9, 9, true)$	145
4.6	Normung von Gleitpunkt-Zahlensystemen	146
4.6.1	IEC/IEEE-Norm für Gleitpunktzahlen	146
4.6.2	Implizites erstes Bit	148
4.6.3	Unendlich, NaNs und Null mit Vorzeichen	148
4.6.4	Auswirkungen auf die Programmiersprachen	149
4.7	Arithmetik in Gleitpunkt-Zahlensystemen	149
4.7.1	Rundung	150
4.7.2	Rundungsfehler	153
4.7.3	Rundung und arithmetische Operationen	157
4.7.4	Implementierung einer Gleitpunktarithmetik	159
4.7.5	Multiple-Precision-Software	162
4.8	Abfrage und Manipulation von Zahlen in Fortran 90	167
4.8.1	Parameter der Gleitpunktzahlen	167
4.8.2	Kenngößen der Gleitpunktzahlen	168
4.8.3	Abstände der Gleitpunktzahlen, Rundung	169
4.8.4	Manipulation von Gleitpunktzahlen	170
4.8.5	Parameter der INTEGER-Zahlen	171
4.8.6	Fallstudie: Produktbildung	172
4.9	Operationen mit algebraischen Daten	175
4.10	Operationen mit Feldern	178
4.10.1	BLAS	179
4.11	Operationen mit analytischen Daten	180
4.11.1	Darstellung von Funktionen	180
4.11.2	Implementierung von Funktionen	181
4.11.3	Operationen mit Funktionen	183
4.11.4	Funktionen als Ergebnisse	187

5	Numerische Algorithmen	188
5.1	Ein intuitiver Algorithmusbegriff	188
5.2	Eigenschaften von Algorithmen	190
5.2.1	Abstraktion	191
5.2.2	Allgemeinheit	191
5.2.3	Finitheit	191
5.2.4	Terminierung	192
5.2.5	Determinismus	193
5.2.6	Determiniertheit	193
5.3	Existenz von Algorithmen	195
5.3.1	Präzisierungen des Algorithmusbegriffs	195
5.3.2	Berechenbare Funktionen	196
5.4	Praktische Lösbarkeit von Problemen	197
5.5	Komplexität von Algorithmen	198
5.5.1	Abstrakte Computermodele	199
5.5.2	Theoretischer Abarbeitungsaufwand	201
5.5.3	Asymptotische Komplexität von Algorithmen	203
5.5.4	Komplexität von Problemen	204
5.5.5	Fallstudie: Matrizenmultiplikation	205
5.5.6	Praktische Aufwandsermittlung	209
5.6	Darstellung von Algorithmen	212
5.6.1	Fortran 90	213
5.6.2	Pseudocode	213
5.7	Rundungsfehlereinfluß auf numerische Algorithmen	215
5.7.1	Arithmetische Algorithmen	215
5.7.2	Implementierung arithmetischer Algorithmen	218
5.7.3	Fehlerfortpflanzung	220
5.7.4	Analyse der Fehlerfortpflanzung	221
5.8	Fallstudie: Gleitpunktzahlen-Summation	230
5.8.1	Paarweise Summation	232
5.8.2	Fehlerkompensierende Summation	234
5.8.3	Vergleich der drei Summationsverfahren	235
5.8.4	Steigende Summation	238
6	Numerische Programme	240
6.1	Qualität numerischer Programme	240
6.1.1	Zuverlässigkeit	240
6.1.2	Portabilität	246
6.1.3	Effizienz	248
6.2	Ursachen geringer Effizienz	251
6.2.1	Fehlender Parallelismus	251
6.2.2	Mangelnde Lokalität von Speicherzugriffen	255
6.2.3	Schlechte Referenzmuster bei Speicherzugriffen	256
6.2.4	Overhead	257
6.3	Messung und Analyse von Leistungsdaten	258

6.3.1	Messung des Leistungsfaktors Arbeit	259
6.3.2	Messung des Leistungsfaktors Zeit	261
6.3.3	Untersuchung der Rechenzeitverteilung (Profiling)	266
6.3.4	Ermittlung leistungshemmender Faktoren	270
6.4	Programmtransformationen zur Steigerung der Effizienz	271
6.5	Architektur-unabhängige Transformationen	272
6.6	Schleifen-Transformationen	273
6.6.1	Aufrollen von Schleifen	274
6.6.2	Aufrollen äußerer Schleifen	277
6.6.3	Schleifenverschmelzung	277
6.6.4	Eliminieren von Verzweigungen in Schleifen	279
6.6.5	Assoziative Transformationen	281
6.6.6	Schleifen-Vertauschung	282
6.6.7	Blocken von Speicherzugriffen	284
6.7	Fallstudie: Matrizenmultiplikation	287
6.7.1	Schleifenvertauschungen	289
6.7.2	Schleifenaufrollen	290
6.7.3	Blockung	292
6.7.4	Blockung mit Kopieren	293
6.7.5	Blockung mit Kopieren und Schleifenaufrollen	294
6.7.6	Optimierende System-Software	296
7	Verfügbare Numerische Software	298
7.1	Softwarekosten	298
7.2	Quellen numerischer Software	300
7.2.1	Numerische Anwendungs-Software	301
7.2.2	Einzelprogramme	301
7.2.3	Numerische Softwarebibliotheken	302
7.2.4	Numerische Softwarepakete	305
7.2.5	Softwarehinweise im vorliegenden Buch	307
7.3	Software und globale Computernetze	308
7.3.1	Internet	309
7.3.2	Kommunikation im Internet – E-mail	312
7.3.3	Diskussionsforen im Internet	313
7.3.4	Betriebsmittelverbund im Internet	313
7.3.5	Internet-Suchdienste	319
7.3.6	Netlib	322
7.3.7	eLib	324
7.3.8	GAMS	324
7.4	Interaktive multifunktionale Programmsysteme	325
7.4.1	Systeme für exploratorische Untersuchungen	325
7.4.2	Systeme für numerische Berechnungen	326
7.4.3	Systeme für symbolische Manipulationen	327
7.4.4	Systeme für die Simulation	327
7.5	Problem Solving Environments	327

7.5.1	Verfügbare Problem Solving Environments	329
7.6	Fallstudie: Software für elliptische partielle Differentialgleichungen	331
7.6.1	Klassifikationsmerkmale	332
7.6.2	Softwarepakete für elliptische Probleme	333
7.6.3	Teile numerischer Programmbibliotheken	336
7.6.4	Einzelprogramme der TOMS-Sammlung	337

III Analytische Modelle

8	Modellbildung durch Approximation	341
8.1	Analytische Modelle	341
8.1.1	Elementare Funktionen als Modelle	342
8.1.2	Algorithmen als Modelle	344
8.2	Information und Daten	345
8.2.1	Algebraische Daten aus diskreter Information	345
8.2.2	Analytische Daten aus kontinuierlicher Information	345
8.2.3	Diskretisierung kontinuierlicher Information	347
8.2.4	Homogenisierung diskreter Daten	349
8.3	Diskrete Approximation	350
8.3.1	Daten der diskreten Approximation	350
8.3.2	Interpolation	352
8.3.3	Fallstudie: Wasserwiderstand von Booten	352
8.4	Funktionsapproximation	355
8.4.1	Nichtadaptive Diskretisierung	355
8.4.2	Adaptive Diskretisierung	356
8.4.3	Algorithmen zur Homogenisierung	357
8.4.4	Zusatzinformation	359
8.5	Wahl der Darstellungsfunktionen	359
8.5.1	Durchgehende und intervallweise Approximation	360
8.5.2	Lineare Approximation	360
8.5.3	Nichtlineare Approximation	363
8.5.4	Globale und lokale Approximation	364
8.5.5	Stetigkeit und Differenzierbarkeit	366
8.5.6	Kondition	367
8.5.7	Invarianz bei Skalierung	369
8.5.8	Nebenbedingungen	369
8.5.9	„Optische Form“	372
8.6	Wahl der Distanzfunktion	372
8.6.1	Mathematische Grundlagen	373
8.6.2	Normen für endlich-dimensionale Räume	376
8.6.3	Normen für unendlich-dimensionale Räume	377
8.6.4	Gewichtete Normen	378
8.6.5	Hamming-Distanz	378
8.6.6	Robuste Abstandsmaße	379

8.6.7	Orthogonale Approximation	382
8.7	Transformation des Problems	384
8.7.1	Ordinatentransformation	385
8.7.2	Kurven	386
9	Interpolation	388
9.1	Interpolationsprobleme	389
9.1.1	Wahl einer Funktionenklasse	389
9.1.2	Bestimmung der Parameter einer Interpolationsfunktion	389
9.1.3	Manipulation der Interpolationsfunktion	390
9.2	Mathematische Grundlagen	391
9.2.1	Das allgemeine Interpolationsprinzip	391
9.2.2	Interpolation bezüglich Wertübereinstimmung	395
9.3	Univariate Polynom-Interpolation	396
9.3.1	Univariate Polynome	396
9.3.2	Darstellungsformen univariater Polynome	397
9.3.3	Koeffizientenberechnung	403
9.3.4	Werteberechnung	405
9.3.5	Approximations- und Konvergenzeigenschaften	409
9.3.6	Verfahrensfehler der Polynom-Interpolation	410
9.3.7	Konvergenz der Interpolationspolynome	413
9.3.8	Kondition der Polynom-Interpolation	422
9.3.9	Wahl der Interpolationsknoten	426
9.3.10	Hermite-Interpolation	430
9.4	Univariate stückweise Polynom-Interpolation	431
9.4.1	Approximationsgenauigkeit	433
9.4.2	Auswertung	434
9.5	Polynom-Splines	434
9.5.1	Überschwingen und Störungsdämpfung	436
9.5.2	Darstellung von Polynom-Splines	438
9.6	B-Splines	440
9.6.1	Wahl der B-Spline-Teilungspunkte	444
9.6.2	B-Splines in der graphischen Datenverarbeitung	445
9.6.3	Software für B-Splines	448
9.7	Kubische Splinefunktionen	450
9.7.1	Randbedingungen	450
9.7.2	Extremaleigenschaft	452
9.7.3	Approximations- und Konvergenzeigenschaften	453
9.7.4	Koeffizientenberechnung	453
9.7.5	Werteberechnung	454
9.7.6	Kondition	454
9.8	Splines mit geringem „Überschwingen“	458
9.8.1	Exponentialsplines	459
9.8.2	ν -Splines	460
9.8.3	Subspline-Interpolation nach Akima	464

9.9	Multivariate Interpolation	467
9.9.1	Tensorprodukt-Interpolation	468
9.9.2	Triangulation	469
9.10	Multivariate Polynom-Interpolation	471
9.11	Multivariate (Sub-) Spline-Interpolation	474
9.11.1	Tensorprodukt-Splinefunktionen	474
9.11.2	Polynomiale Interpolation auf Dreiecken	476
9.12	Andere Aufgaben und Methoden	476
Symbolverzeichnis		478
Literatur		481
Autoren		498
Index		503