

Inhaltsverzeichnis

10 Optimale Approximation	1
10.1 Mathematische Grundlagen	3
10.2 Bestapproximation im Quadratmittel – L_2 -Approximation	6
10.2.1 Grundlagen der L_2 -Approximation	6
10.2.2 Optimale Approximation durch Orthogonalität	10
10.2.3 Normalgleichungen	11
10.2.4 Approximationsfehler	14
10.2.5 Orthogonale Polynome	16
10.3 Diskrete l_2 -Approximation – Methode der kleinsten Quadrate	20
10.3.1 Lineare l_2 -Approximation	20
10.3.2 Nichtlineare l_2 -Approximation	23
10.4 Gleichmäßige Bestapproximation – L_∞ -Approximation	23
10.4.1 Polynome als L_∞ -Approximationsfunktionen	24
10.5 Approximationsalgorithmen	27
10.6 Approximationssoftware für spezielle Funktionen	31
10.6.1 Standardfunktionen	31
10.6.2 FUNPACK	31
10.6.3 IMSL	32
10.6.4 NAG	32
11 Fourier-Transformation	33
11.1 Mathematische Grundlagen	37
11.1.1 Trigonometrische Approximation	41
11.1.2 Das Spektrum	44
11.2 Trigonometrische Interpolation	46
11.3 Faltung	50
11.4 Manipulationen am Signalspektrum	53
11.5 DFT-Algorithmen	55
11.5.1 Schnelle Fourier-Transformation (FFT)	55
11.5.2 FFT von reellen Funktionen	59
11.5.3 FFT in zwei und mehr Dimensionen	62
11.6 FFT-Softwarepakete	63
11.6.1 FFTPACK	63
11.6.2 VFFTPK	63
11.7 FFT in Softwarebibliotheken	63
11.7.1 IMSL-Softwarebibliotheken	63
11.7.2 NAG-Softwarebibliotheken	64
11.8 Sonstige FFT-Programme	65
11.8.1 TOMS-Sammlung	65
11.8.2 Diverse NETLIB-Software	65

12 Numerische Integration	66
12.1 Grundprinzipien der Numerischen Integration	67
12.1.1 Integrationsbereiche	68
12.1.2 Gewichtsfunktionen	68
12.1.3 Integrationsmethoden	69
12.1.4 Kondition des Integrationsproblems	75
12.1.5 Inhärente Unsicherheit numerischer Integration	78
12.2 Vorverarbeitung von Integrationsproblemen	79
12.2.1 Transformation von Integralen	80
12.2.2 Zerlegung von Integrationsbereichen	88
12.2.3 Iteration von Integralen	88
12.3 Univariate Integrationsformeln	90
12.3.1 Konstruktion von Integrationsformeln	90
12.3.2 Einfache interpolatorische Quadraturformeln	100
12.3.3 Zusammengesetzte Quadraturformeln	110
12.3.4 Romberg-Formeln	113
12.3.5 Nichtlineare Extrapolation	115
12.3.6 Spezielle Methoden	117
12.4 Multivariate Integrationsformeln	118
12.4.1 Allgemeine Konstruktionsprinzipien	119
12.4.2 Polynomiale Integrationsformeln	126
12.4.3 Zahlentheoretische Integrationsformeln	128
12.4.4 Monte-Carlo-Integrationsverfahren	138
12.4.5 Gitterpunkt-Integrationsformeln	144
12.4.6 Spezielle Methoden	155
12.5 Integrationsalgorithmen	156
12.5.1 Fehlerschätzung	157
12.5.2 Diskretisierungs-Strategie	164
12.5.3 Adaptive Integrations-Algorithmen und -Programme	166
12.5.4 Software für univariate Probleme: Global adaptive Integrationsprogramme	171
12.5.5 Software für multivariate Probleme: Global adaptive Integrationsprogramme	174
12.5.6 Erhöhung der Zuverlässigkeit	175
12.5.7 Mehrfache Integranden	177

IV Algebraische Modelle

13 Lineare Gleichungssysteme	181
13.1 Planungsphase	183
13.1.1 Problemtyp	184
13.1.2 Strukturmerkmale der Systemmatrix	187
13.1.3 Art der Lösung	188
13.1.4 Forderungen an Algorithmen und Software	189

- 13.2 Realisierungsphase 190
- 13.3 Überprüfungsphase 191
- 13.4 Mathematische Grundlagen 191
 - 13.4.1 Lineare Räume 191
 - 13.4.2 Vektornormen 192
 - 13.4.3 Orthogonalität 194
 - 13.4.4 Lineare Funktionen 195
 - 13.4.5 Matrizen 196
 - 13.4.6 Inverse einer Matrix 199
 - 13.4.7 Eigenwerte einer Matrix 200
 - 13.4.8 Matrixnormen 200
 - 13.4.9 Determinante einer Matrix 203
- 13.5 Spezielle Matrixeigenschaften 204
 - 13.5.1 Symmetrische und Hermitesche Matrizen 204
 - 13.5.2 Orthogonale und unitäre Matrizen 205
 - 13.5.3 Positiv definite Matrizen 205
- 13.6 Speziell besetzte Matrizen 211
 - 13.6.1 Diagonalmatrizen 211
 - 13.6.2 Dreiecksmatrizen 212
 - 13.6.3 Blockmatrizen 212
 - 13.6.4 Hessenberg-Matrizen 214
 - 13.6.5 Tridiagonale Matrizen 214
 - 13.6.6 Bandmatrizen 215
 - 13.6.7 Permutationsmatrizen 215
- 13.7 Singulärwertzerlegung 216
 - 13.7.1 Geometrie linearer Abbildungen 217
 - 13.7.2 Struktur linearer Abbildungen 218
 - 13.7.3 Verallgemeinerte Umkehrabbildungen 220
 - 13.7.4 Allgemeine Lösung linearer Gleichungssysteme 223
 - 13.7.5 Lösung homogener Gleichungssysteme 225
 - 13.7.6 Lineare Ausgleichsprobleme 226
- 13.8 Kondition linearer Gleichungssysteme 228
 - 13.8.1 Kondition regulärer Systeme 229
 - 13.8.2 Auswirkungen einer gestörten rechten Seite 231
 - 13.8.3 Auswirkungen einer gestörten Matrix 233
- 13.9 Kondition linearer Ausgleichsprobleme 236
- 13.10 Konditionsanalyse mittels Singulärwertzerlegung 237
- 13.11 Direkte Verfahren 240
 - 13.11.1 Das Eliminationsprinzip 240
 - 13.11.2 LU-Faktorisierung 243
 - 13.11.3 Pivot-Strategien 245
- 13.12 Gleichungssysteme besonderer Struktur 247
 - 13.12.1 Symmetrische, positiv definite Matrizen 248
 - 13.12.2 Bandmatrizen 249
- 13.13 Beurteilung der erzielten Genauigkeit 250

13.13.1	Konditionsschätzungen	250
13.13.2	Rückwärtsfehleranalyse	251
13.13.3	Nachiteration	252
13.13.4	Experimentelle Konditionsuntersuchung	253
13.14	Verfahren für Ausgleichsprobleme	253
13.14.1	Normalgleichungen	253
13.14.2	QR-Verfahren	253
13.15	LAPACK – Das fundamentale Softwarepaket für die Lineare Algebra	254
13.15.1	Die Vorgeschichte	256
13.15.2	LAPACK und die BLAS	257
13.15.3	Blockalgorithmen	258
13.15.4	Inhaltliche Gliederung des LAPACK	262
13.16	LAPACK-Black-box-Programme	265
13.16.1	Lineare Gleichungssysteme	265
13.16.2	Lineare Ausgleichsprobleme	266
13.17	LAPACK-Rechenprogramme	267
13.17.1	Fehlerschranken	271
13.17.2	Orthogonale Faktorisierungen	272
13.17.3	Singulärwertzerlegung (SVD)	273
13.18	LAPACK-Dokumentation	273
13.18.1	Parameter	274
13.18.2	Fehlerbehandlung	275
13.19	LAPACK-Speicherorganisation	276
13.19.1	Konventionelle Speicherung	276
13.19.2	Gepackte Speicherung	277
13.19.3	Speicherung von Bandmatrizen	277
13.19.4	Tridiagonal- und Bidiagonalmatrizen	278
13.19.5	Orthogonale oder unitäre Matrizen	278
13.20	Blockgröße für Blockalgorithmen	279
13.21	LAPACK-Varianten und Erweiterungen	279
14	Nichtlineare Gleichungen	287
14.1	Iterationsverfahren	295
14.1.1	Fixpunkt-Iteration	296
14.1.2	Konvergenz von Iterationsverfahren	298
14.1.3	Konvergenzgeschwindigkeit	303
14.1.4	Startwertbestimmung	305
14.1.5	Abbruch einer Iteration	309
14.2	Skalare nichtlineare Gleichungen	312
14.2.1	Vielfachheit einer Nullstelle	313
14.2.2	Kondition des Nullstellenproblems	314
14.2.3	Bisektions-Verfahren	316
14.2.4	Newton-Verfahren	319
14.2.5	Sekanten-Verfahren	322

14.2.6	Müller-Verfahren	324
14.2.7	Effizienzvergleich	325
14.2.8	Konvergenzbeschleunigung	326
14.2.9	Polyalgorithmen	328
14.2.10	Polynom-Nullstellen	328
14.3	Systeme nichtlinearer Gleichungen	329
14.3.1	Verallgemeinerte lineare Verfahren	330
14.3.2	Newton-Verfahren	331
14.3.3	Sekanten-Verfahren	335
14.3.4	Modifikationsverfahren	337
14.3.5	Große nichtlineare Systeme	339
14.4	Nichtlinearer Ausgleich	339
14.4.1	Minimierungsverfahren	341
14.4.2	Levenberg-Marquardt-Verfahren	349
14.4.3	Powell-Verfahren	350
14.4.4	Spezielle Funktionen	351
15	Eigenwerte und Eigenvektoren	352
15.1	Mathematische Grundlagen	355
15.1.1	Das charakteristische Polynom	355
15.1.2	Ähnlichkeit	356
15.1.3	Eigenvektoren	358
15.1.4	Unitär-Ähnlichkeit	360
15.1.5	Ähnlichkeit zu (Quasi-) Diagonalmatrizen	365
15.1.6	Eigenwert-Abschätzungen	367
15.2	Kondition des Eigenwertproblems	369
15.3	Vektoriteration	372
15.3.1	Inverse Iteration	374
15.3.2	Inverse Iteration mit Spektralverschiebungen	375
15.4	QR-Algorithmus	375
15.4.1	QR-Algorithmus mit Spektralverschiebungen	376
15.4.2	Aufwandsreduktion bei QR-Algorithmen	377
15.5	Transformation auf Diagonalform	377
15.6	Transformation auf Hessenberg-Form	378
15.6.1	Givens-Verfahren	378
15.6.2	Householder-Verfahren	379
15.7	LAPACK-Programme	379
15.7.1	Symmetrische Eigenprobleme	379
15.7.2	Nichtsymmetrische Eigenprobleme	382
15.7.3	Singulärwertzerlegung (SVD)	385
15.7.4	Allgemeine symmetrische Eigenprobleme	386
15.7.5	Allgemeine nichtsymmetrische Eigenprobleme	387

16 Große schwach besetzte Systeme	391
16.1 Speicherung für iterative Verfahren	394
16.1.1 COO-Format: Koordinatenformat	395
16.1.2 CRS-Format: Komprimierte Zeilenspeicherung	396
16.1.3 MRS-Format: Modifiziertes CRS-Format	396
16.1.4 CCS-Format: Komprimierte Spaltenspeicherung	397
16.1.5 BCRS-Format: Blockweises CRS-Format	397
16.1.6 CDS-Format: Komprimiertes Diagonalenformat	398
16.1.7 BND- bzw. LAPACK-Format für Bandmatrizen	399
16.1.8 JDS-Format: Verschobenes Diagonalenformat	399
16.1.9 SKS-Format: Skyline-Speicherung	400
16.2 Speicherung symmetrischer Matrizen	401
16.3 Speicherung für direkte Verfahren	402
16.3.1 Bandformat	403
16.3.2 Allgemeine Speicherformate	404
16.4 Vergleich der Speicherformate	405
16.5 Direkte Verfahren	407
16.5.1 Gauß-Elimination für schwach besetzte Systeme	407
16.5.2 Bandmatrizen	408
16.5.3 Poisson-Matrizen	409
16.5.4 Matrizen mit allgemeiner Struktur	411
16.6 Iterative Verfahren	413
16.7 Minimierungsverfahren	415
16.7.1 Einzelschritt- (Gauß-Seidel-) Verfahren	417
16.7.2 Gradientenverfahren	418
16.7.3 Gesamtschritt- (Jacobi-) Verfahren	418
16.7.4 Verfahren der konjugierten Gradienten	419
16.7.5 Krylov-Verfahren	421
16.8 Stationäre iterative Verfahren	423
16.8.1 Jacobi-Verfahren	425
16.8.2 Gauß-Seidel-Verfahren	428
16.8.3 Überrelaxationsverfahren (SOR-Verfahren)	429
16.8.4 Symmetrisches SOR-Verfahren (SSOR-Verfahren)	431
16.9 Nichtstationäre iterative Verfahren	431
16.9.1 Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)	433
16.9.2 CG-Verfahren für Normalgleichungen	435
16.9.3 Residuenminimierung (MINRES-Verfahren) und symmetrisches LQ-Verfahren	437
16.9.4 Verallgemeinerte Minimierung des Residuums (GMRES-Verfahren)	437
16.9.5 Bikonjugiertes Gradientenverfahren (BiCG-Verfahren)	438
16.9.6 Quasi-Residuenminimierung (QMR-Verfahren)	439
16.9.7 Quadriertes CG-Verfahren (CGS-Verfahren)	439
16.9.8 Bikonjugiertes stabilisiertes Gradientenverfahren (BiCGSTAB-Verfahren)	440

16.9.9	Tschebyscheff-Iteration	441
16.10	Vorkonditionierung	441
16.10.1	Jacobi-Vorkonditionierung	442
16.10.2	SSOR-Vorkonditionierung	443
16.10.3	Unvollständige Faktorisierung	443
16.10.4	Unvollständige Blockfaktorisierung	444
16.10.5	Unvollständige LQ-Faktorisierung	445
16.10.6	Polynomiale Vorkonditionierung	445
16.11	Matrix-Vektor-Produkte	446
16.11.1	Matrix-Vektor-Produkt im CRS-Format	446
16.11.2	Matrix-Vektor-Produkt im CDS-Format	447
16.12	Parallelisierung	448
16.13	Auswahl eines iterativen Verfahrens	448
16.13.1	Eigenschaften iterativer Verfahren	448
16.13.2	Fallstudie: Vergleich iterativer Verfahren	451
16.14	Software für schwach besetzte Systeme	453
16.15	Elementare Software	454
16.15.1	Harwell-Boeing-Collection	454
16.15.2	SPARSE-BLAS	454
16.15.3	SPARSKIT	456
16.16	Softwarepakete für Gleichungssysteme	457
16.16.1	ITPACK	457
16.16.2	TEMPLATES	458
16.16.3	SLAP	459
16.16.4	Y12M	459
16.16.5	UMFPACK	460
16.16.6	PIM	460
16.17	Programme aus Softwarebibliotheken	461
16.17.1	IMSL-Softwarebibliotheken	461
16.17.2	NAG-Softwarebibliotheken	462
16.17.3	Harwell-Bibliothek	463

V Stochastische Modelle

17	Zufallszahlen	467
17.1	Zufallszahlengeneratoren	467
17.2	Erzeugung gleichverteilter Zufallszahlen	468
17.2.1	Lineare Kongruenzgeneratoren	468
17.2.2	Fibonacci-Generatoren	469
17.2.3	Subtraktionsgeneratoren mit Übertrag	470
17.2.4	Mehrdimensionale gleichverteilte Zufallsvektoren	470
17.2.5	Verbesserung von Zufallszahlengeneratoren	470
17.3	Erzeugung nicht-gleichverteilter Zufallszahlen	471
17.3.1	Inversionsmethode für univariate Verteilungen	473

17.3.2	Ablehnungsmethode	474
17.3.3	Zusammensetzungsmethode	475
17.4	Testen von Zufallszahlen	476
17.5	Software für die Zufallszahlenerzeugung	477
17.5.1	Programmiersprachen	477
17.5.2	IMSL	479
17.5.3	NAG	480
 Symbolverzeichnis		 481
Literatur		484
Autoren		501
Index		506