

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Struktur der Stoffaufbereitung: Methoden und Konzepte	9
2	Fehleranalyse: Kondition, Rundungsfehler, Stabilität	13
2.1	Einleitung	13
2.2	Einige Orientierungsbeispiele	14
2.3	Mathematische Grundlagen: Normen und Taylorentwicklung	18
2.3.1	Normen	18
2.3.2	Lineare Abbildungen und Operatornormen	22
2.3.3	Taylorentwicklung	27
2.4	Kondition eines Problems	30
2.4.1	Relative und Absolute Kondition	31
2.4.2	Relative Konditionszahlen skalarwertiger Probleme	32
2.4.3	Konditionszahlen linearer Abbildungen	38
2.4.4	Kondition einer Basis	42
2.5	Rundungsfehler und Gleitpunktarithmetik	45
2.5.1	Zahlendarstellungen	45
2.5.2	Rundung, Maschinengenauigkeit	48
2.5.3	Gleitpunktarithmetik und Fehlerverstärkung bei elementaren Rechenoperationen	50
2.6	Stabilität eines Algorithmus	56
2.7	Übungen	63
3	Lineare Gleichungssysteme	67
3.1	Einleitung	67
3.1.1	Problemstellung	67
3.1.2	Anwendungshintergründe und Beispiele	69
3.1.3	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	81
3.2	Kondition und Störungssätze	82
3.2.1	Zeilenskalierung	88
3.3	Wie man es nicht machen sollte	89
3.4	Dreiecksmatrizen, Rückwärtseinsetzen	91

3.5	Gauß-Elimination, <i>LR</i> -Zerlegung	94
3.5.1	Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung	98
3.5.2	Numerische Durchführung der <i>LR</i> -Zerlegung und Implementierungshinweise	104
3.5.3	Einige Anwendungen der <i>LR</i> -Zerlegung	108
3.6	Cholesky-Zerlegung	109
3.7	Bandmatrizen	116
3.8	Stabilitätsanalyse bei der <i>LR</i> - und Cholesky-Zerlegung	119
3.8.1	Nachiteration*	123
3.9	<i>QR</i> -Zerlegung	128
3.9.1	Givens-Rotationen	131
3.9.2	Householder-Transformationen	137
3.10	Zusammenfassung	143
3.11	Übungen	145
4	Lineare Ausgleichsrechnung	155
4.1	Einleitung	155
4.1.1	Anwendungshintergründe	155
4.1.2	Problemstellung: lineare Ausgleichsprobleme	158
4.1.3	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	161
4.2	Orthogonale Projektion auf einen Teilraum*	162
4.3	Eigenschaften des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems	169
4.3.1	Die Normalgleichungen	169
4.3.2	Kondition des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems	171
4.3.3	Zum statistischen Hintergrund – lineare Regression*	174
4.4	Numerische Lösung des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems	177
4.4.1	Lösung der Normalgleichungen	177
4.4.2	Lösung über <i>QR</i> -Zerlegung	180
4.5	Die Singulärwertzerlegung (SVD)	183
4.5.1	Berechnung von Singulärwerten	189
4.5.2	Vergleich von Matrixfaktorisierungen	191
4.6	Anwendungen der Singulärwertzerlegung	193
4.6.1	Das allgemeine lineare Ausgleichsproblem	194
4.6.2	Regularisierung schlecht konditionierter Ausgleichsprobleme	196
4.6.3	Niedrigrangapproximation einer Matrix*	204
4.6.4	Datenkompression, Dimensionsreduktion	210
4.7	Zusammenfassung	214
4.8	Übungen	217

5	Nichtlineare Gleichungssysteme	223
5.1	Einleitung	223
5.1.1	Motivation, Beispiele und Problemformulierung	223
5.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	227
5.2	Kondition des Nullstellenproblems*	229
5.2.1	Kondition bei mehrfachen Nullstellen	235
5.2.2	Unvermeidbarer Fehler aufgrund der Auswertung von f	236
5.2.3	Problemtransformation und Kondition	239
5.2.4	Resümee zur Kondition	242
5.3	Fixpunktiteration	243
5.3.1	Motivation und Beispiele	243
5.3.2	Banachscher Fixpunktsatz	249
5.3.3	Lineare Probleme und Fixpunkt-Verfahren	255
5.3.4	Stabilität der Fixpunktiteration	258
5.4	Konvergenzordnung und Fehlerschätzung	260
5.4.1	Fehlerschätzung für skalare Folgen	262
5.4.2	Fehlerschätzung für Vektorfolgen	265
5.5	Berechnung von Nullstellen von skalaren Gleichungen	267
5.5.1	Bisektion	268
5.5.2	Das Newton-Verfahren	269
5.5.3	Newton-ähnliche Verfahren	275
5.5.4	Zusammenfassende Hinweise zu den Methoden für skalare Gleichungen	278
5.6	Das Newton-Verfahren für Systeme	279
5.6.1	Grundlagen des Newton-Verfahrens	279
5.6.2	Hinweise zur praktischen Durchführung des Newton-Verfahrens	286
5.7	Berechnung von Nullstellen von Polynomen*	293
5.8	Zusammenfassung	297
5.9	Übungen	300
6	Nichtlineare Ausgleichsrechnung	307
6.1	Einleitung	307
6.1.1	Problemstellung	307
6.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	310
6.2	Das Gauß-Newton-Verfahren	311
6.2.1	Analyse des Gauß-Newton-Verfahrens	312
6.3	Levenberg-Marquardt-Verfahren	320
6.3.1	Analyse des Levenberg-Marquardt-Verfahrens	323
6.4	Zusammenfassung	326
6.5	Übungen	328

7	Eigenwertprobleme	331
7.1	Einleitung	331
7.1.1	Problemstellung	331
7.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	334
7.2	Einige theoretische Grundlagen	336
7.3	Kondition des Eigenwertproblems	341
7.4	Eigenwertabschätzungen	343
7.5	Eigenwerte als Nullstellen des charakterischen Polynoms	349
7.6	Vektoriteration	352
7.7	Inverse Vektoriteration	358
7.8	<i>QR</i> -Verfahren	363
7.8.1	Die Unterraumiteration	363
7.8.2	<i>QR</i> -Algorithmus	371
7.8.3	Effiziente Varianten des <i>QR</i> -Algorithmus	373
7.9	Zusammenfassung	384
7.10	Übungen	386
8	Interpolation	389
8.1	Einleitung	389
8.1.1	Vorbemerkungen	389
8.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	391
8.2	Lagrange-Interpolationsaufgabe für Polynome	393
8.2.1	Interpolationspolynom: Existenz und Eindeutigkeit	394
8.2.2	Interpolationspolynom: Auswertung an wenigen Stellen	400
8.2.3	Interpolationspolynom: Darstellung in der monomialen Basis	403
8.2.4	Interpolationspolynom: Darstellung in der Newtonschen Basis	406
8.2.5	Restglieddarstellung – Fehleranalyse	412
8.2.6	Grenzen der Polynominterpolation	418
8.3	Hermite-Interpolationsaufgabe für Polynome*	420
8.4	Numerische Differentiation	426
8.5	Interpolation mit trigonometrischen Polynomen*	428
8.5.1	Fourier-Reihen und Fourier-Transformation	428
8.5.2	Trigonometrische Interpolation und diskrete Fourier-Transformation	438
8.5.3	Schnelle Fourier-Transformation (Fast Fourier Transform FFT)	451
8.6	Zusammenfassung	457
8.7	Übungen	460

9	Splinefunktionen	465
9.1	Einleitung	465
9.1.1	Vorbemerkungen	465
9.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	466
9.2	Beispiel einer kubischen Splineinterpolation	467
9.3	Splineräume und Approximationsgüte	473
9.4	B-Splines	476
9.4.1	B-Splines als Basis für den Splineraum	481
9.4.2	Kondition der B-Spline-Basis	484
9.4.3	Rechnen mit Linearkombinationen von B-Splines	485
9.5	Splineinterpolation	489
9.6	Datenfit: Smoothing-Splines	496
9.7	Zusammenfassung	500
9.8	Übungen	501
10	Numerische Integration	505
10.1	Einleitung	505
10.1.1	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	505
10.1.2	Kondition des Problems	507
10.2	Die Trapezregel	507
10.3	Interpolatorische Quadratur	511
10.3.1	Newton-Cotes-Formeln	514
10.3.2	Gauß-Quadratur	517
10.4	Extrapolation und Romberg-Quadratur*	523
10.5	Zweidimensionale Integrale	529
10.5.1	Transformation von Integralen	529
10.5.2	Integration über dem Einheitsquadrat	533
10.5.3	Integration über dem Einheitsdreieck	534
10.6	Zusammenfassung	535
10.7	Übungen	537
11	Gewöhnliche Differentialgleichungen	541
11.1	Einleitung	541
11.1.1	Problemstellung und Beispiele	541
11.1.2	Orientierung: Strategien, Konzepte, Methoden	546
11.2	Reduktion auf ein System 1. Ordnung	548
11.3	Einige theoretische Grundlagen	550
11.4	Einfache Einschrittverfahren	556
11.5	Fehlerbetrachtungen für Einschrittverfahren	564
11.5.1	Lokaler Abbruchfehler und Konsistenz	565
11.5.2	Zusammenhang zwischen Konsistenz und Konvergenz	570
11.5.3	Extrapolation	577
11.6	Runge-Kutta-Einschrittverfahren	578
11.6.1	Explizite RK-Verfahren	583
11.6.2	Analyse expliziter RK-Verfahren	586
11.6.3	Implizite RK-Verfahren*	589

11.7	Schrittweitensteuerung bei Einschrittverfahren	594
11.8	Mehrschrittverfahren	599
11.8.1	Allgemeine lineare Mehrschrittverfahren	599
11.8.2	Adams-Bashforth-Verfahren	602
11.8.3	Adams-Moulton-Verfahren	604
11.8.4	Prädiktor-Korrektor-Verfahren	606
11.8.5	Konvergenz von linearen Mehrschrittverfahren*	608
11.9	Steife Systeme	612
11.9.1	Einleitung	612
11.9.2	Stabilitätsintervalle	617
11.9.3	Stabilitätsgebiete: A-Stabilität*	620
11.9.4	Rückwärtsdifferenzenmethoden	622
11.10	Zusammenfassung	626
11.11	Übungen	628
Literatur		637
Stichwortverzeichnis		639