ISNM

INTERNATIONAL SERIES OF NUMERICAL MATHEMATICS
INTERNATIONALE SCHRIFTENREIHE ZUR NUMERISCHEN MATHEMATIK
SÉRIE INTERNATIONALE D'ANALYSE NUMÉRIQUE

VOL. 33

NUMERISCHE PROZEDUREN

AUS NACHLASS UND LEHRE

VON

PROF. HEINZ RUTISHAUSER

HERAUSGEGEBEN

VON

WALTER GANDER

LUCIANO MOLINARI

HANA ŠVECOVÁ

NUMERIKERGRUPPE DER ETH ZÜRICH

1977

BIRKHÄUSER VERLAG BASEL

UND STUTTGART

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Rutishauser, Heinz
[Sammlung]
Numerische Prozeduren: aus Nachlass u. Lehre/
hrsg. von Walter Gander ... - 1. Aufl. - Basel,
Stuttgart: Birkhäuser, 1977.
(International series of numerical mathematics;
Vol. 33)

ISBN-13: 978-3-7643-0874-2 e-ISBN-13: 978-3-0348-7176-1
DOI: 10.1007/978-3-0348-7176-1

GELEITWORT

Heinz Rutishauser, der 1970 im Alter von 52 Jahren verstorbene Pionier der modernen numerischen Mathematik, hinterliess ein bedeutendes wissenschaftliches Erbe. Sein Nachlass umfasst neben seinen Vorlesungen über numerische Mathematik auch eine Anzahl fertiger Rechenprozeduren zur Lösung verschiedener Standardaufgaben der angewandten Mathematik. Die auf Detailprobleme verwendete Sorgfalt und die Originalität, mit welcher kritische Situationen narrensicher gemeistert werden, lassen auch diese Prozeduren als typische Produkte des Rutishauserschen Geistes erscheinen. Es ist daher zu begrüssen, dass sich W. Gander, L. Molinari und H. Švecová, drei ehemalige Mitarbeiter von Rutishauser, zusammengefunden haben, um die interessantesten dieser Prozeduren zu erläutern, auszutesten, sorgfältig zu dokumentieren, in Einzelheiten zu verbessern und zur Publikation vorzubereiten.

Bemerkenswert an diesen Prozeduren und im Einklang mit modernsten Bestrebungen ist der Umstand, dass sie völlig maschinenunabhängig definiert sind. Alle für Konvergenztests benötigten Konstanten werden von der Prozedur selbst erzeugt. Dass zur Beschreibung die Programmiersprache "Subset ALGOL 60" verwendet wird, eine Sprache also, an deren Entwicklung Rutishauser selbst massgeblich beteiligt war, bedarf wohl keiner weiteren Rechtfertigung.

Ich danke Herrn C. Einsele vom Birkhäuser Verlag, dass er sich bereit erklärt hat, diese Prozedurensammlung in die bekannte Internationale Schriftenreihe zur Numerischen Mathematik aufzunehmen, und ich freue mich, dass dadurch ein weiteres Werk des grossen Schweizer Mathematikers Heinz Rutishauser der Oeffentlichkeit zugänglich geworden ist.

P. Henrici

EINLEITUNG

Jeder der fünf Beiträge dieses Buches ist in folgende Abschnitte gegliedert:

1. Einleitung
   Zweck und Anwendungsmöglichkeit des Algorithmus.
2. Theoretische Grundlagen
   Dieser Abschnitt befasst sich mit den mathematischen Grundlagen, auf denen der formale Algorithmus beruht. Im formalen Algorithmus ist die endliche Computerarithmetik nicht berücksichtigt.
3. Prozeduraufruf und Parameterliste
   Es wird beschrieben, mit welchen Parametern die Prozedur aufzurufen ist und welche Resultate geliefert werden.
4. Listing der Prozedur
   Der Algorithmus wird in diesem Abschnitt in Form einer Subset ALGOL 60 Prozedur (Numerische Mathematik 6, 454–458, 1964) maschinenunabhängig dokumentiert.
5. Bemerkungen über Organisation und Notation
   In diesem Abschnitt werden programmiertechnische Details beschrieben, die für die Durchfürung des Algorithmus auf einem Computer mit endlicher Arithmetik wesentlich sind.
6. Numerische Eigenschaften
   Der Algorithmus wird verglichen mit andern und es wird auf Fehleranalyse, Rechenaufwand und Versagen des Algorithmus hingewiesen.
7. und 8. Anwendungen und Beispiele
   Spezielle Anwendungsmöglichkeiten des Algorithmus werden erwähnt und Testbeispiele aufgeführt.

Die Prozedur *lataeq* (Latteninterpolation) kann vorteilhaft für die Interpolation bei sehr vielen Stützpunkten verwendet werden. Der Rechenaufwand nimmt nur linear zur Anzahl Stützstellen zu. Interessant ist bei *liglei* (Auflösung linearer Gleichungssysteme) die Behandlung numerisch singulärer Gleichungssysteme. In maschinell unabhängiger Weise wird die Maschinengenauigkeit ermittelt. In kritischen Fällen wird eventuell unter Anpassung der konstanten Glieder eine Lösung des singulären Systems berechnet. Die Prozedur *vermag* kann für die Lösung verschiedener Probleme im Zusammenhang mit der vermittelnden Ausgleichsrechnung verwendet werden. Wenn die Fehlergleichungsmatrix nicht Maximalrang besitzt, ist die Lösung nicht mehr eindeutig, was für die Praxis störend sein kann. Eindeutigkeit wird erzwungen durch Berechnen von relaxierten und doppelrelaxierten Lösungen. Der Schmidt'sche Orthogonalisierungsalgorithmus der Prozedur *orthno* ist zu verwenden, wenn höchste Ansprüche an die numerische Orthogonalität von Vektoren gestellt werden. Besonders sorgfältig werden numerische Skalarprodukte berechnet. Auf Wunsch können Vektoren superorthogonalisiert werden, d.h. ihre gegenseitigen numerisch berechneten Skalarprodukte werden klein gemacht gegenüber den Skalarprodukten der Betragsvektoren. Die Prozedur *qdstat* schliesslich zeigt einige der Ideen Rutishausers bezüglich der Persistenz von Eigenschaften eines Algorithmus. Eine Eigenschaft ist persistent, wenn sie bei der Durchführung des Algorithmus auf einem Computer bestehen bleibt. Die Abbruchkriterien sind maschinenunabhängig gewählt und Genauigkeitsverlust bei Unterfluss wird sorgfältig minimiert.

Die Autoren danken Prof. P. Henrici für sein Interesse und seine Unterstützung. Ohne seine Hilfe wäre diese Publikation nicht entstanden. Auch ihrem Kollegen Johann Joss danken sie für die fruchtbaren Diskussionen.

Buchs, 1977 W. GANDER

INHALTSVERZEICHNIS