

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Was ist die zu lösende Aufgabe, wo liegen die Schwierigkeiten?	1
1.1.1	Aufgabenbeispiele	1
1.1.2	Größenordnung der Dimension	3
1.1.3	Exakte oder näherungsweise Berechnung	3
1.2	Komplexität der Algorithmen	3
1.2.1	Komplexität	3
1.2.2	Warum braucht man (fast) lineare Komplexität für großskalige Probleme?	5
1.3	Zugrundeliegende Strukturen und Implementierungsdarstellungen	6
1.3.1	Vektor- und Matrixnotation	6
1.3.2	Implementierungsdarstellungen	7
1.3.3	Darstellungen und Operationen	12
1.4	In welchen Fällen ist lineare Komplexität erreichbar?	13
1.4.1	Familie der Diagonalmatrizen	13
1.4.2	Anwendung der schnellen Fourier-Transformation	13
1.4.3	Schwierigkeiten in anderen Fällen	14
1.5	Wo entstehen großskalige Probleme?	15
1.5.1	Diskretisierung elliptischer Differentialgleichungen	15
1.5.2	Integralgleichungen und ihre Diskretisierung	17
1.6	Angeordnete bzw. nicht angeordnete Indexmengen	21
1.6.1	Indexmengen	21
1.6.2	Vektoren $x \in \mathbb{R}^I$	22
1.6.3	Matrizen $A \in \mathbb{R}^{I \times I}$	22
1.6.4	Anordnung bzw. Nichtanordnung bei hierarchischen Matrizen	23
1.7	Übersicht über die weiteren Kapitel	23
1.7.1	Lokale Rang- k -Matrizen	23
1.7.2	Hierarchie und Matrixoperationen	24

2	Rang-k-Matrizen	25
2.1	Allgemeines	26
2.2	Darstellung und Kosten	26
2.3	Operationen und ihre Kosten	28
2.4	Bestapproximation durch Rang- k -Matrizen	30
2.5	Bestapproximation von Rang- ℓ -Matrizen durch Rang- k - Matrizen	33
2.6	Rang- k -Matrix-Addition mit anschließender Kürzung	35
2.6.1	Formatierte Addition	35
2.6.2	Formatierte Agglomeration	36
2.6.3	Mehr als zwei Terme	36
2.6.4	Stufenweise ausgeführte Agglomeration	38
2.7	Varianten der Rang- k -Matrixdarstellungen	39
2.7.1	AKB-Darstellung	39
2.7.2	SVD-Darstellung	41
3	Einführendes Beispiel	43
3.1	Das Modellformat \mathcal{H}_p	43
3.2	Zahl der Blöcke	44
3.3	Speicheraufwand	45
3.4	Matrix-Vektor-Multiplikation	45
3.5	Matrix-Addition	45
3.6	Matrix-Matrix-Multiplikation	46
3.7	Matrixinversion	48
3.8	LU-Zerlegung	49
3.8.1	Vorwärtssubstitution	49
3.8.2	Rückwärtssubstitution	50
3.8.3	Aufwand der LU-Zerlegung	50
3.9	Weitere Eigenschaften der Modellmatrizen und Semiseparabilität*	51
4	Separable Entwicklung und ihr Bezug zu Niedrigrangmatrizen	55
4.1	Grundbegriffe	56
4.1.1	Separable Entwicklungen	56
4.1.2	Exponentielle Konvergenz	57
4.1.3	Zulässigkeitsbedingungen an X, Y	59
4.2	Separable Polynom-Entwicklungen	60
4.2.1	Taylor-Entwicklung	60
4.2.2	Interpolation	62
4.2.3	Exponentielle Fehlerabschätzung	63
4.2.4	Asymptotisch glatte Kerne	64
4.2.5	Taylor-Fehlerabschätzung	65
4.2.6	Interpolationsfehler für $d = 1$	66
4.2.7	Verschärfte Fehlerabschätzung	68

4.2.8	Interpolationsfehler für $d > 1$	69
4.3	Weitere separable Entwicklungen	70
4.3.1	Andere Interpolationsverfahren *	70
4.3.2	Transformationen *	70
4.3.3	Stückweise separable Entwicklung *	71
4.3.4	Kerne, die von $x - y$ abhängen	72
4.3.5	L -harmonische Funktionen *	72
4.3.6	Separable Entwicklungen mittels Kreuzapproximation *	73
4.3.7	Die optimale separable Entwicklung	73
4.4	Diskretisierung von Integraloperatoren mit separablen Kernfunktionen	74
4.4.1	Einführung: Separable Entwicklung und Galerkin- Diskretisierung	74
4.4.2	Separable Entwicklung und allgemeine Diskretisierungen *	76
4.5	Approximationsfehler *	78
4.5.1	Operatornormen	78
4.5.2	Matrixnormen	79
4.5.3	Sachgerechte Normen	81
5	Matrixpartition	83
5.1	Einleitung	83
5.1.1	Ziele	83
5.1.2	Eindimensionales Modellbeispiel	84
5.2	Zulässige Blöcke	85
5.2.1	Metrik der Cluster	85
5.2.2	Zulässigkeit	87
5.2.3	Verallgemeinerte Zulässigkeit	89
5.2.4	Erläuterung am Beispiel aus §5.1.2	90
5.3	Clusterbaum $T(I)$	91
5.3.1	Definitionen	91
5.3.2	Beispiel	92
5.3.3	Blockzerlegung eines Vektors	93
5.3.4	Speicherkosten für $T(I)$	94
5.4	Konstruktion des Clusterbaums $T(I)$	96
5.4.1	Notwendige Daten	96
5.4.2	Geometriebasierte Konstruktion mittels Minimalquader	97
5.4.3	Kardinalitätsbasierte Konstruktion	101
5.4.4	Implementierung und Aufwand	101
5.4.5	Auswertung der Zulässigkeitsbedingung	102
5.5	Blockclusterbaum $T(I \times J)$	104
5.5.1	Definition des stufentreuen Blockclusterbaums	104
5.5.2	Verallgemeinerung der Definition	105
5.5.3	Alternative Konstruktion von $T(I \times J)$ aus $T(I)$ und $T(J)$	107

5.5.4	Matrixpartition	108
5.5.5	Beispiele	111
5.6	Alternative Clusterbaumkonstruktionen und Partitionen	112
6	Definition und Eigenschaften der hierarchischen Matrizen	113
6.1	Menge $\mathcal{H}(k, P)$ der hierarchischen Matrizen	113
6.2	Elementare Eigenschaften	115
6.3	Schwachbesetztheit und Speicherbedarf	116
6.3.1	Definition	116
6.3.2	Speicherbedarf einer hierarchischen Matrix	118
6.4	Abschätzung von C_{sp}^*	120
6.4.1	Erster Zugang	120
6.4.2	Abschätzung zu Konstruktion (5.30)	123
6.4.3	Anmerkung zu Konstruktion (5.34)	127
6.5	Fehlerabschätzungen	128
6.5.1	Frobenius-Norm	128
6.5.2	Vorbereitende Lemmata	128
6.5.3	Spektralnorm	135
6.5.4	Norm $\ \cdot \ $	136
6.6	Adaptive Rangbestimmung	138
6.7	Rekompressionstechniken	140
6.7.1	Kompression durch $\mathcal{T}_\varepsilon^{\mathcal{H}}$	140
6.7.2	Vergrößerung der Blöcke	141
6.8	Modifikationen des \mathcal{H} -Matrixformates	141
6.8.1	\mathcal{H} -Matrizen mit Gleichungsnebenbedingungen	141
6.8.2	Positive Definitheit	143
6.8.3	Positivität von Matrizen	144
6.8.4	Orthogonalität von Matrizen	146
7	Formatierte Matrixoperationen für hierarchische Matrizen	147
7.1	Matrix-Vektor-Multiplikation	148
7.2	Kürzungen und Konvertierungen	148
7.2.1	Kürzungen $\mathcal{T}_{k \leftarrow \ell}^{\mathcal{R}}$, $\mathcal{T}_k^{\mathcal{R}}$ und $\mathcal{T}_{k \leftarrow \ell}^{\mathcal{H}}$	148
7.2.2	Agglomeration	150
7.2.3	Konvertierung $\mathcal{T}_k^{\mathcal{R} \leftarrow \mathcal{H}}$	150
7.2.4	Konvertierung $\mathcal{T}_{P' \leftarrow P}^{\mathcal{H} \leftarrow \mathcal{H}}$	152
7.2.5	Konvertierung $\mathcal{T}_{P' \leftarrow P}^{\mathcal{H} \leftarrow \mathcal{H}}$ bei unterschiedlichen Blockclusterbäumen *	152
7.3	Addition	154
7.4	Matrix-Matrix-Multiplikation	155
7.4.1	Komplikationen bei der Matrix-Matrix-Multiplikation ..	155
7.4.2	Algorithmus im konsistenten Fall	157
7.4.3	Algorithmus im stufentreuen Fall	167
7.5	Matrix-Inversion	170
7.5.1	Rekursiver Algorithmus	170

7.5.2	Alternativer Algorithmus mittels Gebietszerlegung	172
7.5.3	Newton-Verfahren	172
7.6	LU- bzw. Cholesky-Zerlegung	173
7.6.1	Format der Dreiecksmatrizen	173
7.6.2	Auflösung von $LUx = b$	174
7.6.3	Matrixwertige Lösung von $LX = Z$ und $XU = Z$	176
7.6.4	Erzeugung der LU- bzw. Cholesky-Zerlegung	177
7.7	Hadamard-Produkt	178
7.8	Aufwand der Algorithmen	179
7.8.1	Matrix-Vektor-Multiplikation	179
7.8.2	Matrix-Addition	179
7.8.3	Matrix-Matrix-Multiplikation	180
7.8.4	Matrix-Inversion	188
7.8.5	LU- bzw. Cholesky-Zerlegung	189
8	\mathcal{H}^2-Matrizen	191
8.1	Erster Schritt: $M _b \in \mathcal{V}_b \otimes \mathcal{W}_b$	191
8.2	Zweiter Schritt: $M _{\tau \times \sigma} \in \mathcal{V}_\tau \otimes \mathcal{W}_\sigma$	195
8.3	Definition der \mathcal{H}^2 -Matrizen	197
8.3.1	Definition	197
8.3.2	Transformationen	197
8.3.3	Speicherbedarf	199
8.3.4	Projektion auf \mathcal{H}^2 -Format	200
8.4	Hinreichende Bedingungen für geschachtelte Basen	202
8.4.1	Allgemeiner Fall	202
8.4.2	Beispiel: Approximation von Integraloperatoren durch Interpolation	203
8.5	Matrix-Vektor-Multiplikation mit \mathcal{H}^2 -Matrizen	204
8.5.1	Vorwärtstransformation	204
8.5.2	Multiplikationsphase	205
8.5.3	Rücktransformation	206
8.5.4	Gesamtalgorithmus	206
8.6	\mathcal{H}^2 -Matrizen mit linearem Aufwand	207
8.7	Adaptive Bestimmung der \mathcal{H}^2 -Räume \mathcal{V}_τ und \mathcal{W}_σ	209
8.8	Matrix-Matrix-Multiplikation von \mathcal{H}^2 -Matrizen	213
8.8.1	Multiplikation bei gegebenem \mathcal{H}^2 -Format	213
8.8.2	Multiplikation bei gesuchtem \mathcal{H}^2 -Format	214
8.9	Numerisches Beispiel	215
9	Verschiedene Ergänzungen	217
9.1	Konstruktion schneller Iterationsverfahren	217
9.2	Modifizierte Clusterbäume für schwach besetzte Matrizen	219
9.2.1	Problembeschreibung	219
9.2.2	Finite-Element-Matrizen	220
9.2.3	Separierbarkeit der Matrix	222

9.2.4	Konstruktion des Clusterbaums	224
9.2.5	Anwendung auf Invertierung	226
9.2.6	Zulässigkeitsbedingung	226
9.2.7	LU-Zerlegung	227
9.2.8	\mathcal{H} -Matrixeigenschaften der LU-Faktoren	228
9.2.9	Geometriefreie Konstruktion der Partition	231
9.3	Schwache Zulässigkeit	232
9.3.1	Definition und Abschätzungen	232
9.3.2	Beispiel $k(x, y) = \log x - y $	234
9.3.3	Zusammenhang mit der Matrixfamilie $\mathcal{M}_{k, \tau}$	235
9.4	Kreuzapproximation	238
9.4.1	Basisverfahren und theoretische Aussagen	238
9.4.2	Praktische Durchführung der Kreuzapproximation	239
9.4.3	Adaptive Kreuzapproximation	241
9.4.4	Erzeugung separabler Entwicklungen mittels Kreuzapproximation	243
9.4.5	Die hybride Kreuzapproximation	245
9.5	Kriterien für Approximierbarkeit in $\mathcal{H}(k, P)$	246
9.6	Änderung der Matrizen bei Gitterverfeinerung	249
10	Anwendungen auf diskretisierte Integraloperatoren	251
10.1	Typische Integraloperatoren für elliptische Randwertaufgaben	251
10.1.1	Randwertproblem und Fundamentallösung	252
10.1.2	Einfach-Schicht-Potential für das Dirichlet-Problem	252
10.1.3	Direkte Methode, Doppelschicht-Operator	253
10.1.4	Hypersingulärer Operator	254
10.1.5	Calderón-Projektion	254
10.2	Newton-Potential	255
10.3	Randelementdiskretisierung und Erzeugung der Systemmatrix in hierarchischer Form	255
10.4	Helmholtz-Gleichung für hohe Frequenzen	257
10.5	Allgemeine Fredholm-Integraloperatoren	258
10.6	Anwendungen auf Volterra-Integraloperatoren	258
10.6.1	Diskretisierungen von Volterra-Integraloperatoren	258
10.6.2	Implementierung als Standard- \mathcal{H} -Matrix	260
10.6.3	Niedrigrangdarstellung von Profilmatrizen	261
10.6.4	Matrix-Vektor-Multiplikation	262
10.7	Faltungsgintegrale	265
11	Anwendungen auf Finite-Element-Matrizen	267
11.1	Inverse der Massematrix	267
11.2	Der Green-Operator und seine Galerkin-Diskretisierung	271
11.2.1	Das elliptische Problem	271
11.2.2	Die Green-Funktion	272
11.2.3	Der Green-Operator \mathcal{G}	272

11.2.4	Galerkin-Diskretisierung von \mathcal{G} und der Zusammenhang mit A^{-1}	273
11.2.5	Folgerungen aus separabler Approximation der Greenschen Funktion	275
11.3	Analysis der Greenschen Funktion	279
11.3.1	L -harmonische Funktionen und innere Regularität	280
11.3.2	Approximation durch endlich-dimensionale Unterräume	282
11.3.3	Hauptresultat	284
11.3.4	Anwendung auf die Randelementmethode	289
11.3.5	FEM-BEM-Kopplung	290
12	Inversion mit partieller Auswertung	291
12.1	Baum der Gebietszerlegung und zugehörige Spurabbildungen ..	292
12.2	Diskrete Variante - Übersicht	294
12.3	Details	295
12.3.1	Finite-Element-Diskretisierung und Matrixformulierung	295
12.3.2	Zerlegung der Indexmenge	297
12.3.3	Die Abbildung Φ_ω	298
12.3.4	Natürliche Randbedingung	298
12.3.5	Zusammenhang der Matrizen	299
12.3.6	Die Abbildung Ψ_ω	299
12.3.7	Konstruktion von Φ_ω aus Ψ_{ω_1} und Ψ_{ω_2}	300
12.3.8	Konstruktion von Ψ_ω aus Ψ_{ω_1} und Ψ_{ω_2}	303
12.4	Basisalgorithmus	304
12.4.1	Definitionsphase	304
12.4.2	Auswertungsphase	305
12.4.3	Homogene Differentialgleichung	306
12.5	Verwendung hierarchischer Matrizen	306
12.6	Partielle Auswertung	308
12.6.1	Basisverfahren	309
12.6.2	Realisierung mit hierarchischen Matrizen	310
12.6.3	Vergrößerung des Ansatzraumes für die rechte Seite ..	311
12.6.4	Berechnung von Funktionalen	311
13	Matrixfunktionen	313
13.1	Definitionen	313
13.1.1	Funktionserweiterung mittels Diagonalmatrizen	314
13.1.2	Potenzreihen	315
13.1.3	Cauchy-Integraldarstellung	316
13.1.4	Spezialfälle	317
13.2	Konstruktionen spezieller Funktionen	317
13.2.1	Approximation von Matrixfunktionen	317
13.2.2	Matrix-Exponentialfunktion	319
13.2.3	Inverse Funktion $1/z$	324
13.2.4	Anwendung von Newton-artigen Verfahren	328

13.3	\mathcal{H} -Matrix-Approximation	328
13.3.1	Matrix-Exponentialfunktion	328
13.3.2	Approximation nichtglatter Matrixfunktionen	328
14	Matrixgleichungen	329
14.1	Ljapunow- und Sylvester-Gleichung	330
14.1.1	Definition und Lösbarkeit	330
14.1.2	Andere Lösungsverfahren	331
14.2	Riccati-Gleichung	332
14.2.1	Definition und Eigenschaften	332
14.2.2	Lösung mittels der Signumfunktion	333
14.3	Newton-artige Verfahren zur Lösung nichtlinearer Matrixgleichungen	334
14.3.1	Beispiel der Quadratwurzel einer Matrix	334
14.3.2	Einfluss der Kürzung bei Fixpunktiterationen	335
15	Tensorprodukte	339
15.1	Tensor-Vektorraum	339
15.1.1	Notationen	339
15.1.2	Hilbert-Raum-Struktur	341
15.1.3	Datenkomplexität	341
15.2	Approximation im Tensorraum	341
15.2.1	k -Term-Darstellung	341
15.2.2	k -Term-Approximation	342
15.2.3	Darstellung mit Tensorprodukten von Unterräumen	343
15.3	Kronecker-Produkte von Matrizen	343
15.3.1	Definitionen	343
15.3.2	Anwendung auf die Exponentialfunktion	345
15.3.3	Hierarchische Kronecker-Tensorproduktdarstellung	346
15.4	Der Fall $d = 2$	346
15.4.1	Tensoren	346
15.4.2	Kronecker-Matrixprodukte	348
15.4.3	Komplexitätsbetrachtungen	349
15.4.4	HKT-Darstellung	350
15.5	Der Fall $d > 2$	351
15.5.1	Spezielle Eigenschaften	351
15.5.2	Inverse eines separablen Differentialoperators	353
A	Graphen und Bäume	355
A.1	Graphen	355
A.2	Bäume	356
A.3	Teilbäume	358
A.4	Bäume zu Mengenerlegungen	359

B	Polynome	363
	B.1 Multiindizes	363
	B.1.1 Notation	363
	B.1.2 Formelsammlung	363
	B.2 Polynomapproximation	364
	B.3 Polynominterpolation	366
	B.3.1 Eindimensionale Interpolation	366
	B.3.2 Tensorprodukt-Interpolation	369
C	Lineare Algebra, Funktionalanalysis,	
	Singulärwertzerlegung	371
	C.1 Matrixnormen	371
	C.2 Singulärwertzerlegung von Matrizen	373
	C.3 Hilbert-Räume, L^2 -Operatoren	377
	C.4 Singulärwertzerlegung kompakter Operatoren	379
	C.4.1 Singulärwertzerlegung	379
	C.4.2 Hilbert-Schmidt-Operatoren	381
	C.5 Abbildungen zu Galerkin-Unterräumen	383
	C.5.1 Orthogonale Projektion	383
	C.5.2 Unterraubasis, Prolongation, Restriktion, Massematrix	383
	C.5.3 Norm $\ \cdot \ $	385
	C.5.4 Bilinearformen, Diskretisierung	388
D	Sinc-Interpolation und -Quadratur	391
	D.1 Elementare Funktionen	391
	D.2 Interpolation	392
	D.2.1 Definitionen	392
	D.2.2 Stabilität der Sinc-Interpolation	393
	D.2.3 Abschätzungen im Streifen \mathfrak{D}_d	394
	D.2.4 Abschätzungen durch $e^{-CN/\log N}$	397
	D.2.5 Approximation der Ableitung	399
	D.2.6 Meromorphes f	399
	D.2.7 Andere Singularitäten	400
	D.3 Separable Sinc-Entwicklungen	400
	D.3.1 Direkte Interpolation	400
	D.3.2 Transformation und Skalierung	401
	D.3.3 Eine spezielle Transformation	403
	D.3.4 Beispiel $1/(x+y)$	404
	D.3.5 Beispiel $\log(x+y)$	408
	D.4 Sinc-Quadratur	409
	D.4.1 Quadraturverfahren und Analyse	409
	D.4.2 Separable Entwicklungen mittels Quadratur	411
	D.4.3 Beispiel: Integrand $\exp(-rt)$	412
	D.4.4 Beispiel: Integrand $\exp(-r^2t^2)$	416

E	Asymptotisch glatte Funktionen	419
E.1	Beispiel $ x - y ^{-a}$	419
E.1.1	Richtungsableitungen	419
E.1.2	Gemischte Ableitungen	423
E.1.3	Analytizität	424
E.2	Asymptotische Glattheit weiterer Funktionen	425
E.3	Allgemeine Eigenschaften asymptotisch glatter Funktionen ...	427
E.3.1	Hilfsabschätzungen	428
E.3.2	Abschätzung für Richtungsableitungen	429
E.3.3	Aussagen für beschränkte Gebiete	430
E.3.4	Produkte asymptotisch glatter Funktionen	431
	Literaturverzeichnis	435
	Notationen	443
	Sachverzeichnis	447