

**Extrapolationsverfahren für
Zahlen-, Vektor- und Matrizenfolgen
und ihre Anwendung in der
Theoretischen und Physikalischen
Chemie**

Habilitationsschrift

**Naturwissenschaftliche Fakultät IV
– Chemie und Pharmazie –
Universität Regensburg**

vorgelegt von

Herbert H. H. Homeier

1996

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Mathematische Methoden	1
1.2	Übersicht über die Arbeit	3
I	Methoden	5
2	Bekannte Verfahren für Zahlenfolgen	7
2.1	Grundlagen	7
2.1.1	Klassifikation von Zahlenfolgen	8
2.1.2	Allgemeines zur Konstruktion von Extrapolationsverfahren	8
2.1.3	Rekursionsschemata	11
2.2	Algorithmen	12
2.2.1	E -Algorithmus	12
2.2.2	Shanks-Transformation und ϵ -Algorithmus	14
2.2.3	Aitken-Verfahren	16
2.2.4	ρ -Algorithmus	17
2.2.5	Richardson-Verfahren	17
2.2.6	BDG-Algorithmus und Osada-Verfahren	17
2.2.7	Levin-artige Verfahren	18
2.2.8	Overholt-Verfahren	20
3	Iterative Folgentransformationen	23
3.1	Zur Konstruktion iterativer Folgentransformationen	24
3.2	Hierarchische Konsistenz	27
3.3	Die \mathcal{J} -Transformation	29
3.3.1	Heuristische Herleitung	29
3.3.2	Alternative Algorithmen zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation	33
3.3.3	Allgemeine Eigenschaften der \mathcal{J} -Transformation	36
3.3.4	Der Kern der \mathcal{J} -Transformation	45
3.3.5	Determinantendarstellungen	48
3.3.6	Konvergenzeigenschaften	55
3.3.7	Relation zu anderen Folgentransformationen	61

3.3.8	Numerische Tests	69
4	Restabschätzungen	95
4.1	Einleitung	95
4.2	Methode	96
4.3	Numerische Beispiele	99
5	Orthogonalentwicklungen	103
5.1	Levin-artige Algorithmen für Fourier-Reihen	104
5.1.1	Modellfolge der \mathcal{H} -Transformation	104
5.1.2	Herleitung der \mathcal{H} -Transformation	106
5.1.3	Rekursive Berechnung der \mathcal{H} -Transformation	107
5.1.4	Eigenschaften der \mathcal{H} -Transformation	108
5.1.5	Theoretische Konvergenzaussagen für die \mathcal{H} -Transformation	110
5.1.6	Implementierung der \mathcal{H} -Transformation	113
5.1.7	Numerische Tests der \mathcal{H} -Transformation	114
5.1.8	Verallgemeinerung auf mehrere Frequenzen	117
5.2	Iterative Algorithmen für Fourier-Reihen	118
5.2.1	Hierarchisch konsistente Herleitung	118
5.2.2	Alternative Algorithmen	122
5.2.3	Numerische Tests	122
5.3	Sprungstellen und Singularitäten	123
5.3.1	Beschreibung der Methode	123
5.3.2	Numerische Beispiele	129
5.4	Rückführung von Fourier-Reihen auf andere Reihen	153
5.4.1	Rückführung auf alternierende Reihen	153
5.4.2	Rückführung auf komplexe Potenzreihen	156
5.5	Orthogonalpolynomentwicklungen	164
5.5.1	Ein iterativer Algorithmus für Orthogonalentwicklungen	166
5.5.2	Rückführung auf andere Reihentypen	169
6	Störungstheoretische Methoden	177
6.1	Goldhammer-Feenberg- und Feenberg-Reihe	178
6.2	Effektive charakteristische Polynome	182
7	Bekanntes nichtskalare Verfahren	187
7.1	Grundlagen	188
7.1.1	Pseudoinverse	189
7.1.2	Iterationsfolgen	191
7.1.3	Funktionen einer Matrix	196
7.2	Algorithmen	198
7.2.1	Die DIIS-Methode	199

7.2.2	Epsilon-Algorithmen	200
7.2.3	Der Vektor- E -Algorithmus	202
7.2.4	H -Algorithmus	202
7.2.5	Projektionsmethoden	203
8	Die verallgemeinerte \mathcal{J} Transformation	207
8.1	Varianten für Matrizenfolgen	207
8.1.1	Matrix-I- \mathcal{J} -Transformation	207
8.1.2	Matrix-R- \mathcal{J} -Transformation	209
8.1.3	Matrix-T- \mathcal{J} -Transformation	210
8.2	Varianten für Vektorfolgen	211
8.2.1	Vektor- \mathcal{J} -Transformation	211
8.2.2	Topologische \mathcal{J} -Transformation	212
8.3	Numerische Beispiele	214
II	Anwendungen	221
9	Spektrale Löcher	223
9.1	Beschreibung des Modells	223
9.2	Einfache Darstellungen für die Faltungsintegrale	224
9.2.1	Integraldarstellung	225
9.2.2	Taylor-Reihe	225
9.2.3	Modifizierte Reihendarstellung	227
9.2.4	Asymptotische Darstellung	228
9.3	Verwendung von Extrapolationsverfahren	229
9.3.1	Resonante Löcher in TPP	239
10	Extrapolation von Multipolentwicklungen	241
10.1	Elektrostatisches Potential	243
10.2	Dreizentrig Kernanziehungsintegrale	245
10.3	Ein einfaches Beispiel	247
10.4	Numerische Tests	249
10.4.1	Multipolentwicklung	249
10.4.2	Exakte Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen	251
11	Quasiteilchen und Dyson-Gleichung	259
11.1	Physikalische Grundlagen	261
11.2	Numerische Tests	265
11.2.1	Diskrete Spektren	266
11.2.2	Tight-Binding-Modell	269

12 Anwendung auf die Vielteilchenstörungstheorie	271
12.1 Überblick	271
12.2 Numerische Resultate	273
13 Lösung der OZ-Gleichung	283
13.1 Physikalischer Hintergrund	283
13.2 Ein Algorithmus für Direkte Iteration	285
13.3 Numerische Resultate	287
14 Zusammenfassung	297
III Anhänge	301
A Notationen und Definitionen	303
A.1 Definition von Mengensymbolen	303
A.2 Definition spezieller Symbole und Funktionen	303
A.3 Differentialoperatoren	306
A.4 Exponentialartige Basisfunktionen	307
A.5 Stieltjes-Reihen	307
B Einige Lemmas	309
C Eine asymptotisch verwandte Reihe	313
D Programm für die \mathcal{H}-Transformation	315
E Mehrere Störungsreihen	317
Literaturverzeichnis	323
Danksagungen	353

Tabellenverzeichnis

3.1	Beschleunigung der Folge $s_{n-1} = (\cos(x_n) + a \sin(x_n))^{1/x_n} \cdot \exp(-a)$ für $a = 1, x_n = 0.8^n$	70
3.2	Beschleunigung von $s_{n-1} = (\cos(1/n) + a \sin(1/n))^n \cdot \exp(-a)$ für $a = 1$ und $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$ mit $s_{-1} = 1$	72
3.3	Beschleunigung der Folge $s_{n-1} = (1+x/n)^n \cdot \exp(-x)$ für $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$ mit $s_{-1} = 1$ und $x = 1$	73
3.4	Beschleunigung der Reihe $\zeta(2)$ unter Verwendung von $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$	74
3.5	Beschleunigung der Reihe für die Lemniskatenkonstante A mit $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$	77
3.6	Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 1/2$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(1/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$	79
3.7	Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 1/2$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(3/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$	80
3.8	Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(1/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$	82
3.9	Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(3/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$	83
3.10	Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 3$ mit $\omega_n = \Delta s_{n-1}$	89
3.11	Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 3$ mit $\omega_n = \Delta s_n$	90
3.12	Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 1/2$ mit $\omega_n = \Delta s_{n-1}$	91
3.13	Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 1/2$ mit $\omega_n = \Delta s_n$	92
3.14	Beschleunigung der Reihe $z {}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = -0.9$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$	93
3.15	Beschleunigung der Reihe $z {}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = 1$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$	94
3.16	Summation der Reihe $z {}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = 5$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$	94
4.1	k -Variante für logarithmische Konvergenz	100
4.2	Vergleich von k -, t - und u -Variante für $F_0(4)$	102
4.3	Vergleich von k -, t - und u -Variante für $F_0(8)$	102
5.1	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \exp(\alpha)$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 0.1$	114
5.2	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe von $f(\alpha) = 1 + \alpha$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$	115
5.3	Vergleich der \mathcal{H} -Transformation (5.16) mit Wynn's ϵ -Algorithmus für die Fourier-Reihe (5.62).	116
5.4	Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \alpha^2$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$	124

5.5	Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = 1 + \alpha$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$	125
5.6	Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \exp(\alpha)$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 0.1$	126
5.7	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.110) für $\alpha = 9\pi/10$ (14-16 Stellen)	130
5.8	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 5$ zur Reihe (5.110) für $\alpha = 9\pi/10$ (14-16 Stellen)	131
5.9	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.110) für $\alpha = 99\pi/100$ (14-16 Stellen)	132
5.10	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 50$ zur Reihe (5.110) für $\alpha = 99\pi/100$ (14-16 Stellen)	133
5.11	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (32-34 Stellen)	135
5.12	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (32-34 Stellen)	136
5.13	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (32-34 Stellen)	137
5.14	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)	138
5.15	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)	139
5.16	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)	140
5.17	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)	141
5.18	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 10$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)	142
5.19	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 20$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)	143
5.20	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)	144
5.21	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)	145
5.22	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)	146
5.23	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)	147
5.24	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)	148
5.25	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)	149

5.26	Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen)	150
5.27	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 10$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen) . . .	151
5.28	Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 20$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen) . . .	152
5.29	Rückführung der Fourier-Reihe (5.94) für $\alpha = 2.3$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation	154
5.30	Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.7\pi$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation . .	155
5.31	Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.9\pi$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation . .	156
5.32	Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.9\pi$ auf eine assoziierte Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation	158
5.33	Beschleunigung der Fourier-Reihe (5.126) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = 8\pi/10$ und $\alpha_2 = \alpha_1/2^{1/2}$	160
5.34	Beschleunigung der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$	161
5.35	Beschleunigung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 2$ der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$	163
5.36	Beschleunigung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 3$ der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$	164
5.37	Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für verschiedene Werte von x . . .	168
5.38	Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.9$	169
5.39	Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.9$ mit Frequenzvervielfachung $\tau = 3$	170
5.40	Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.95$	171
5.41	Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.95$ mit Frequenzvervielfachung $\tau = 4$	172
5.42	Beschleunigung der Reihe (5.162) durch Rückführung auf vier komplexe Reihen für $\alpha = \pi/6$ und $\theta = 2\pi/3$	175
5.43	Beschleunigung der Reihe (5.162) durch Rückführung auf vier komplexe Reihen für $\alpha = 0.6\pi$ und $\theta = 2\pi/3$ mit Frequenzvervielfachung auf $\tau = 10$.	176
8.1	Matrixexponentialfunktion: Definitionen	216
8.2	Matrixexponentialfunktion: DIIS-Verfahren	217
8.3	Matrixexponentialfunktion: ϵ -Algorithmen	218
8.4	Matrixexponentialfunktion: Vektor- \mathcal{J} -Transformation	219
9.1	t - und k -Levin-Transformation der Taylor-Reihe für $G_2(5, 50, 1, 1)$	230

9.2	${}_2\mathbf{J}$ -Transformation der Taylor-Reihe für $G_2(5, 100, 1, 1)$	231
9.3	${}_2\mathbf{J}$ -Transformation der Taylor-Reihe für $G_0(5, 100, 1, 1)$	232
9.4	Anwendung der ${}_2\mathbf{U}$ -Transformation auf die asymptotische Entwicklung für $G_2(0, 200, 1, 1)$	233
10.1	Multipolmomente q_ℓ	250
10.2	\mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung (10.30) für $r = 4$ und $\theta = 60$ Grad	251
10.3	\mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 4$ und $\theta = 2$ Grad	251
10.4	\mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 12$ und $\theta = 2$ Grad	252
10.5	\mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 3$ und $\theta = 45$ Grad	252
10.6	\mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 4$ und $\theta = 60$ Grad	257
10.7	\mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 4$ und $\theta = 2$ Grad	258
10.8	\mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 12$ und $\theta = 2$ Grad	258
11.1	Diskrete Spektren ($M = 2, \epsilon = 0.1$)	266
11.2	Diskrete Spektren ($M = 2, \epsilon = 0.2$)	267
11.3	Diskrete Spektren ($M = 2, \epsilon = -1$)	267
11.4	Diskrete Spektren ($M = 10, \epsilon = 3.91001, 30\text{-}32$ Stellen)	268
11.5	Diskrete Spektren ($M = 10, \epsilon = 3.91001, 14\text{-}16$ Stellen)	268
11.6	Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 8.95$)	269
11.7	Tight-Binding Modell ($\epsilon = 11.05$)	269
11.8	Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 5$)	270
11.9	Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 3$)	270
12.1	Vergleich von Verfahren zur Berechnung der Korrelationsenergie	274
12.2	Statistischer Vergleich verschiedener Verfahren zur Korrelationsenergieberechnung	280
12.3	Dissoziationsbarriere (kJ/mol) für $\text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$ mit einer TZ2P-Basis bei MP2-Geometrien	281
12.4	Barrierrhöhe und Reaktionswärme (kJ/mol) für $\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_7$ mit einer 6-31G*-Basis	281
13.1	OZ-Gleichung: Harte Kugeln	288
13.2	OZ-Gleichung: Lennard-Jones-Potential	289
13.3	OZ-Gleichung: Harte Kugeln und LJ-Potential	290
13.4	OZ-Gleichung: Einkomponentenplasmen	291
13.5	OZ-Gleichung: CPU-Zeiten	292
13.6	OZ-Gleichung: Harte Kugeln für hohe Dichten	293

Abbildungsverzeichnis

9.1	Polarisationsgrad ρ als Funktion von $x_0 > 0$	234
9.2	Differenzsignal $H_{\parallel} - H_{\perp}$ als Funktion von $x_0 > 0$	235
9.3	Parallelsignal H_{\parallel} als Funktion von $x_0 > 0$	236
9.4	Polarisationsgrad ρ als Funktion des Parallelsignals H_{\parallel}	237
9.5	Polarisationsgrad ρ als Funktion von H_{\perp}	238
9.6	Fit resonanter Löcher an TPP: Parallelsignal	239
9.7	Fit resonanter Löcher an TPP: Differenzsignal	240
10.1	Ladungsdichte	249
10.2	Multipolentwicklung ($r = 4, \theta = 60$)	253
10.3	Multipolentwicklung ($r = 4, \theta = 2$)	253
10.4	Multipolentwicklung ($r = 12, \theta = 2$)	254
10.5	Multipolentwicklung ($r = 3, \theta = 45$)	254
10.6	Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 4$	255
10.7	Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 5$	255
10.8	Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 9$	256
10.9	Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 11$	256
10.10	Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 15$	257
13.1	Instabiler Fixpunkt der Direkten Iteration	294
13.2	Quasiperiodisches Verhalten der Direkten Iteration	295
13.3	Konvergenz des Cycling-Verfahrens	295

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Die Rolle mathematischer Methoden in der Theoretischen Chemie

Die theoretische Chemie zielt auf die Berechenbarkeit molekularer Systeme auf der Grundlage hochentwickelter, quantenmechanischer Modelle. Angestrebt wird die Verwendung von *ab initio* Verfahren, die keine experimentellen Parameter enthalten und prinzipiell exakte Resultate liefern können. Dabei gibt es einen inversen Zusammenhang zwischen der Größe des betrachteten chemischen Systems und dem Niveau theoretischer Beschreibung, das anwendbar ist. Für große Systeme muß man auf semiempirische Verfahren oder klassische Modelle (Kraftfeldmethoden) zurückgreifen.

Dabei werden numerisch sehr aufwendige Methoden verwendet, die massiven Computereinsatz erfordern. Quantenchemische und molekulardynamische Rechnungen gehören dabei oft zur Spitzengruppe bei der Inanspruchnahme von Computerressourcen. Zum Beispiel waren am *San Diego Supercomputer Center* in einem Zeitraum von etwa acht Monaten unter den 10 Programmen mit dem größten Rechenzeitanteil 6 Programme aus dem Bereich der Quantenchemie oder Moleküldynamik mit insgesamt 24.8 % Anteil, darunter auch die drei Spitzenreiter. [80, Tab. 1.1, S. 9] Daher setzt sich im angelsächsischen Bereich die Bezeichnung *Computational Chemistry* ergänzend zu *Theoretical Chemistry* immer mehr durch.

Durch den Einsatz immer leistungsfähigerer Computer, aber auch durch die Verwendung verbesserter mathematischer Methoden und Algorithmen konnte in den vergangenen 30 Jahren die Grenze der Berechenbarkeit zu immer größeren Systemen verschoben werden. Bei den Computern geht dabei der Trend zu verstärktem Einsatz von parallelen bis hin zu massiv parallelen Systemen. In Bereich der mathematischen Verfahren wurden in einer Untersuchung des amerikanischen *National Research Council* aus dem Jahre 1995 unter anderem die folgenden Methoden als erfolgreich bewertet [80]:

- Verfahren der Linearen Algebra bei der Diagonalisierung von großen Matrizen und Lösung von linearen Gleichungssystemen,

- statistische Methoden im Bereich von quantitativen Struktur-Wirkungs-Beziehungen im Bereich der Bewertung der biologischen Aktivität von Molekülen,
- algebraische Methoden bei der Beschreibung von Symmetrien von Molekülen, Kristallen und Quasikristallen,
- topologische, graphentheoretische und kombinatorische Methoden bei der Beschreibung der Topologie chemischer Systeme wie der von Polymeren, der Bestimmung der Zahl chemischer Isomere, sowie der Beschreibung chemischer Reaktionen, die bei dem Aufbau von Datenbanken im Bereich der Synthese sehr hilfreich sind.

Um größere chemisch interessante Systeme berechnen zu können, ist neben einem weiteren Ausbau der Rechenkapazität ein Zusammenwirken von Chemie und Mathematik unumgänglich. Die folgenden Arbeitsgebiete wurden in der besagten Untersuchung des *National Research Council* beispielsweise als vielversprechend eingestuft [80]:

- Numerische Methoden in der Theorie der Elektronenstruktur, unter anderem die Berechnung und Abspeicherung großer Zahlen von Zweielektronenintegralen in einer gewählten Basis, die Diagonalisierung großer Matrizen, die Bestimmung effizienter Suchverfahren für Minima und Sattelpunkte der Energiehyperfläche, die Konstruktion und Auswahl geeigneter Basisfunktionen, die schnelle Konvergenz bezüglich Größe der Basis garantieren sollen, sowie Verfahren zur Berechnung von Fehler-schranken für die Energie und andere molekulare Eigenschaften [80, S. 48].
- Die Verschmelzung der Quantenmechanik mit einfacheren Modellen [80, S. 51].
- Molekulardynamische Algorithmen [80, S. 53].
- Theoretische Chemie in Räumen mit nichtganzzahligen Dimensionen [80, S. 65].
- Minimierung von Funktionen mit vielen Variablen [80, S. 68].
- Quanten-Monte-Carlo-Verfahren für die Lösung der Schrödinger-Gleichung [80, S. 94].
- Die Berechnung von hochdimensionalen Integralen mit oszillierenden Integranden.
- Schnelle algebraische Transformationsmethoden [80, S. 105] wie zum Beispiel die *Fast Fourier Transformation* (FFT) oder die *Fast Multipole Method* (FFM) [142, 143, 144, 296].

In der Chemie sind fast beliebig große Systeme wie zum Beispiel Makromoleküle oder Polymere von Interesse, deren Struktur und deren Eigenschaften man derzeit eben aufgrund ihrer Größe nur unzureichend auf hohem theoretischen Niveau berechnen kann. Daher wird in der erwähnten Untersuchung die folgende Empfehlung ausgesprochen [80, S. 118]:

Interdisciplinary Research. The committee recommends that mathematics and chemistry departments encourage and value individual and collaborative research that is at the interface of the two disciplines. Such work has the potential for significant intellectual impact on computational chemistry, and hence on the future evolution of chemical research and its applications to problems of importance in our society.

Genau an dieser Schnittstelle zwischen Chemie und Mathematik liegt die vorliegende Arbeit.

1.2 Übersicht über die Arbeit und Abgrenzung des Themas

Untersucht werden Extrapolationsmethoden und ihre Anwendungen in der Chemie. Die Methoden und die Anwendungen sind dabei in je einem eigenen Teil zusammengefaßt.

Extrapolationsverfahren bilden ein rasch expandierendes Gebiet der Numerischen Mathematik, mit Anwendungen auf Systeme linearer oder nichtlinearer Gleichungen, die Berechnung von Eigenwerten und Eigenvektoren von Matrizen, die Lösung von Integral- und Differentialgleichungen, Interpolation und Approximation, Statistik sowie Integration und Differentiation. Das derzeitige Standardwerk vom mathematischen Standpunkt ist das Buch von Brezinski und Redivo Zaglia [59]. Näherungsverfahren liefern häufig eine Folge von immer genaueren Approximationen für bestimmte Größen, das gesuchte Ergebnis ist dann der Grenzwert dieser Folge. Bei den Folgeelementen kann es sich um Zahlen handeln, wie zum Beispiel bei den Partialsummen unendlicher Reihen, aber auch um kompliziertere Objekte wie (endlichdimensionale) Vektoren und Matrizen, wie zum Beispiel bei den Dichtematrizen bei der iterativen Lösung der Hartree-Fock-Roothaan-Gleichungen, oder gar um Funktionen und Operatoren, wie zum Beispiel bei der iterativen Lösung von Integralgleichungen. Die Extrapolation von Funktionen- und Operatorfolgen wird in dieser Arbeit allerdings nicht behandelt werden.

Extrapolationsmethoden sind relativ gut untersucht für Zahlenfolgen von einem Konvergenztyp, wie man sie bei der Berechnung von Potenzreihen erhält. Trotzdem gibt es auch in diesem Bereich noch Spielraum für neue Verfahren, insbesondere im Bereich der iterativen Verfahren, die leicht zu programmieren sind, deren theoretisches Verständnis aber oft unzureichend ist. Hierzu sind Beiträge in der vorliegenden Arbeit zu finden. Als eine Anwendung dieser Methoden wird die Berechnung der Linienform spektraler Löcher diskutiert.

Schwieriger und weitaus weniger verstanden ist die Extrapolation von Orthogonalentwicklungen, deren prominentestes Beispiel die Fourier-Reihen darstellen. Für diese und für Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen werden umfangreiche Untersuchungen und zahlreiche neue Methoden vorgestellt, deren Anwendung auf Multipolentwicklungen diskutiert wird. Weitere Anwendungen im Bereich der Inversion der Laplace-Transformation

können aus Platzgründen nicht diskutiert werden (Vergleiche aber den Artikel von Ho-meier [162]).

Im Bereich der Vielteilchenstörungstheorie finden spezielle Extrapolationsverfahren für Zahlenfolgen eine Anwendung, die direkt auf das Problem zugeschnitten sind. Dies wird in der vorliegenden Arbeit diskutiert. Nicht eingehen werden wir auf die Summation von divergenten Störungsreihen, wie sie insbesondere von Weniger [78, 79, 368, 369, 372, 375, 374, 373, 377, 378] für anharmonische Oszillatoren untersucht wurde.

Die Extrapolation von Iterationsfolgen ist ein wichtiges Gebiet und für Zahlenfolgen recht gut verstanden. Als Anwendung wird die iterative Lösung der inversen Dyson-Gleichung in diagonaler Näherung zur Berechnung von korrelierten Quasiteilchenenergien behandelt.

Die Extrapolationsverfahren für Vektor- und Zahlenfolgen werden zunehmend untersucht. Einen Beitrag dazu wird in der vorliegenden Arbeit durch Einführung neuer Verfahren geliefert. Als Anwendung wird die Konvergenzbeschleunigung von Iterationsverfahren behandelt, wie sie zur Lösung der Ornstein-Zernike-Gleichung mit verschiedenen Abschlußrelationen verwendet wird. Nicht eingegangen werden kann auf die Verwendung dieser Verfahren für die iterative Lösung von linearen Gleichungssystemen. [59]

Zusammenfassend kann man als Ziel der Arbeit angeben, Extrapolationsmethoden besser zu verstehen, wobei auch neue Verfahren eingeführt und charakterisiert werden, sowie die Nützlichkeit dieser Methoden im Bereich der Theoretischen und Physikalischen Chemie anhand ausgewählter Anwendungen zu demonstrieren.

Teil I

Methoden

Kapitel 2

Bekannte Verfahren für Zahlenfolgen

In diesem Kapitel werden bekannte Extrapolationsverfahren für Zahlenfolgen diskutiert. Zunächst werden Grundlagen zusammengestellt, die immer wieder im Verlauf dieser Arbeit benötigt werden. Dann werden einige wichtige, bekannte Algorithmen vorgestellt, insoweit sie für die vorliegende Arbeit bedeutsam sind. Es wird kein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben. Für über das Folgende hinausgehende Informationen muß auf die Literatur verwiesen werden, insbesondere auf die Bücher von Brezinski und Redivo Zaglia [59] und Wimp [394] sowie die Arbeiten von Weniger [368, 372, 375, 374], aber auch auf die Bücher von Baker [15], Baker und Graves-Morris [16, 17], Brezinski [50, 51, 53, 57, 56], Graves-Morris [135, 136], Graves-Morris, Saff und Varga [141], Khovanskii [207], Lorentzen und Waadeland [231], Nikishin und Sorokin [263], Petrushev und Popov [283], Ross [299], Saff und Varga [306], Wall [361], Werner und Buenger [387] und Wuytack [398].

2.1 Grundlagen

Folgen $\{s_n\}$, die nur langsam gegen einen Limes s konvergieren, findet man in der Mathematik und ihren Anwendungen in Naturwissenschaften und Technik sehr häufig. Es besteht daher ein Bedarf an Methoden, diese Konvergenz zu beschleunigen. Solche Folgen können beispielsweise Partialsummen unendlicher Reihen sein oder auch Iterationsfolgen. In anderen Fällen treten divergente Entwicklungen auf, die man zu einem sinnvollen Ergebnis summieren muß. Dieses Ergebnis s nennt man dann den Antilimes. Von Interesse sind demnach Methoden zur Konvergenzbeschleunigung, zur Extrapolation und zur Summation.

Leider ist keine einzelne Methode in der Lage, alle Probleme von diesem Typ zu lösen, die in der Praxis auftreten. Es wurden daher eine ganze Reihe von Methoden entwickelt. Gute allgemeine Einführungen in diese Methoden findet man bei Wimp [394], bei Weniger [368] und bei Brezinski und Redivo Zaglia [59].

2.1.1 Klassifikation von Zahlenfolgen

Um den Einsatzbereich der Methoden zu umreißen, ist es nützlich, die Problemkreise klassifizieren zu können. Eine sehr hilfreiche Klassifikation ist möglich für Zahlenfolgen $\{s_n\}_{n=0}^{\infty}$, deren Elemente die Beziehung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_{n+1} - s}{s_n - s} = \rho \quad (2.1)$$

erfüllen. Dann heißt die Folge *linear konvergent* für $0 < |\rho| < 1$. Für $\rho = 1$ heißt sie *logarithmisch konvergent* und für $\rho = 0$ heißt sie *hyperlinear konvergent*. Für $|\rho| > 1$ divergiert die Folge.

2.1.2 Allgemeines zur Konstruktion von Extrapolationsverfahren

Wir diskutieren einige allgemeine Fragen der Beschleunigung langsam konvergenter Folgen $\{s_n\}$. Bei vielen der folgenden allgemeinen Erwägungen ist es unerheblich, ob es sich bei den Folgeelementen um Zahlen, Vektoren oder Matrizen handelt.

Das Grundprinzip ist die Ausnutzung struktureller Informationen, die in den Daten verborgen ist. Hat man diese Informationen extrahiert, kann man sie benutzen, um den Grenzwert der Folge rascher auszurechnen. Das Resultat ist üblicherweise eine *Folgentransformation* der Gestalt

$$\begin{aligned} s_n &\implies t_n \\ \{s_n\}_{n=0}^{\infty} &: \text{Ursprüngliche Folge,} \\ \{t_n\}_{n=0}^{\infty} &: \text{Transformierte Folge.} \end{aligned} \quad (2.2)$$

Die transformierte Folge konvergiert schneller, falls die Folgentransformation erfolgreich war. Schnellere Konvergenz ist dabei als

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{t_n - s}{s_n - s} = 0 \quad (2.3)$$

definiert.

Dabei muß man einerseits einen Weg finden, um den Typ der strukturellen Information zu identifizieren, und andererseits die Information nutzen, um eine Folgentransformation zu konstruieren.

Ein wichtiges gedankliches Hilfsmittel zur Beschreibung solch struktureller Informationen ist die Zerlegung

$$s_n = s + R_n \quad (2.4)$$

eines Folgeelementes in (Anti-)Limes s und *Rest* R_n . Extrapolationsverfahren benutzen bestimmte Informationen über den Rest, um ihn gänzlich oder näherungsweise zu eliminieren.

Sowohl Identifikation als auch Ausnutzung der strukturellen Information kann man mit dem Verfahren der *Modellfolgen* gemeinsam behandeln. In diesem Verfahren benutzt man Modelle für den Rest. Dann sucht man Transformationen, die — für die resultierende Modellfolge — die exakte Berechnung des (Anti-)Limes erlauben.

Wir beschreiben das Prinzip dieses Verfahrens nun etwas formaler. Man betrachtet dabei Modellfolgen $\{\sigma_n\}$ der Form

$$\sigma_n = \sigma + m_n(c_i, p_i) \quad \xRightarrow{T} \quad \sigma = T_n(\sigma_n, \dots, \sigma_{n+k}|p_i). \quad (2.5)$$

exakt

Hierbei hängt das Modell m_n des Restes von einer endlichen Anzahl von Koeffizienten c_i sowie von weiteren Parametern p_i ab. Die Transformation T eliminiert die Koeffizienten c_i und erlaubt die exakte Berechnung des Grenzwertes σ der Modellfolge $\{\sigma_n\}$ als Funktion einiger Folgeelemente σ_{n+j} . Die Transformation T ist spezifisch für das Modell und hängt parametrisch von den p_i ab.

Die Transformation T kann aber auch auf die Problemfolge s_n angewandt werden. Dann resultiert eine Folgentransformation

$$t_n = T_n(s_n, \dots, s_{n+k}|p_i) \quad (\text{genähert}). \quad (2.6)$$

Die Erwartung ist, daß die transformierte Folge $\{t_n\}$ schneller als die ursprüngliche Folge $\{s_n\}$ konvergiert, wenn diese Problemfolge in irgendeinem Sinne der Modellfolge dicht benachbart ist und demnach durch die Modellfolge approximiert wird:

$$s_n \approx \sigma_n. \quad (2.7)$$

Zur Charakterisierung des Restes benutzt man häufig Näherungen oder Abschätzungen $\omega_n \neq 0$ für den Rest, die im folgenden als *Restabschätzungen* bezeichnet werden. Diese sollten eine Beziehung der Art

$$\lim_{n \rightarrow \infty} R_n / \omega_n = c \quad (2.8)$$

zumindest näherungsweise erfüllen, wobei c eine Konstante mit $0 < |c| < \infty$ bezeichnet.

Dann kann man etwas speziellere Modelle betrachten, bei denen der Modellrest m_n in eine Restabschätzung $\omega_n \neq 0$ und einen Korrekturfaktor $\mu_n(c_i, \pi_i)$ gemäß

$$\sigma_n = \sigma + \omega_n \mu_n(c_i, \pi_i) \quad (2.9)$$

aufgespalten wird. Parameter sind jetzt die π_i . Man kann natürlich auch die Restabschätzungen ω_n als Parameter auffassen. Es ist allerdings oft sehr nützlich, eine Abhängigkeit der Restabschätzungen ω_n von den Elementen s_n der Problemfolge zuzulassen. Extrapolationsverfahren, die auf derartig faktorisierten Modellen basieren, werden wir als *Levin-artige Verfahren* bezeichnen, da sie eine Methode von Levin generalisieren, die weiter unten besprochen wird.

In der Praxis benutzt man für Zahlenfolgen je nach Problemklasse meist auf Arbeiten von Levin [222] und von Smith und Ford [328] zurückgehende einfache Restabschätzungen der Form

$$\omega_n = \Delta s_{n-1}, \quad (2.10a)$$

$$\omega_n = \Delta s_n, \quad (2.10b)$$

$$\omega_n = (n + \beta)\Delta s_{n-1}, \quad (2.10c)$$

$$\omega_n = -\Delta s_n \Delta s_{n-1} / \Delta^2 s_{n-1}, \quad (2.10d)$$

mit dem Differenzenoperator Δ , der gemäß $\Delta f(n) = f(n+1) - f(n)$ auf n wirkt.

Diese Varianten der Restabschätzungen ω_n führen zu entsprechenden Varianten für alle Folgentransformationen, in die Restabschätzungen eingehen. Diese bezeichnen wir als *t-Variante* im Falle von Gl. (2.10a), als *\tilde{t} -Variante* im Falle von Gl. (2.10b), als *u-Variante* im Falle von Gl. (2.10c) und als *v-Variante* im Falle von Gl. (2.10d). Bis auf die *v*-Variante sind diese Restabschätzungen auch für Vektor- und Matrizenfolgen verwendbar. Andere Methoden zur Gewinnung von Restabschätzungen werden gesondert besprochen.

Ein anderer erfolgreicher Zugang für die Konstruktion von Folgentransformationen ist die Iteration einer einfachen Folgentransformation T_0 :

$$s_n \xrightarrow{T_0} s'_n \xrightarrow{T_0} s''_n \xrightarrow{T_0} \dots \xrightarrow{T_0} s_n^{(k)} \quad (2.11)$$

Dieses Konzept ist sehr erfolgreich im Falle von Zahlenfolgen [368, 370, 162, 160, 161].

Ein weiteres, relativ allgemeines Verfahren zur Konstruktion von Folgentransformation besteht darin, eine funktionale Abhängigkeit $s(x; \vec{p})$ zu postulieren, wobei die Funktion von einem kontinuierlichen Argument x und einer Anzahl von Parametern $\vec{p} = (p_i)$ abhängt. Diese Funktion kann zum Beispiel ein Polynom in x sein, wobei die Parameter die Koeffizienten dieses Polynoms sind. Man fordert nun, daß $s(x_j) = s_j$ für $j = 0, 1, \dots, n$ gilt. Dies sind Interpolationsbedingungen. Hier ist x_n eine bekannte Hilfsfolge, die gegen einen Wert x_∞ konvergiert. Diese Bedingungen fixieren dann die Parameter \vec{p} . Der (Anti-)Limes s der Folge s_n wird für nunmehr bekannte Parameter \vec{p} durch $s(x_\infty; \vec{p})$ approximiert. Wird $x_\infty = 0$ verwendet, so sprechen wir von *Extrapolation bei Null*. Wird $x_\infty = \infty$ verwendet, so sprechen wir von *Extrapolation bei Unendlich*.

Von besonderer Bedeutung sind für gegebene Folgentransformation T die Folgen $\{s_n\}$, für die die Transformation den Grenzwert s exakt berechnet. Der *Kern* der Folgentransformation $T : \{s_n\} \rightarrow \{t_n\}$ ist definiert als die Menge aller Folgen $\{s_n\}$, die dies erfüllen, für die also $t_n = s$ für genügend große $n \geq N$ gilt, wobei s der (Anti-)Limes von $\{s_n\}$ ist.

2.1.3 Rekursionsschemata

Sehr häufig liefern Extrapolationsverfahren zweidimensionale Felder von Werten $T_n^{(k)}$, die man in einer T -Tafel anordnen kann:

$$\begin{array}{cccc}
 T_0^{(0)} & T_0^{(1)} & T_0^{(2)} & \dots \\
 T_1^{(0)} & T_1^{(1)} & T_1^{(2)} & \dots \\
 T_2^{(0)} & T_2^{(1)} & T_2^{(2)} & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \\
 T_n^{(0)} & T_n^{(1)} & T_n^{(2)} & \dots \\
 \vdots & \vdots & \vdots &
 \end{array} \tag{2.12}$$

Der Index n wächst also, wenn man nach unten, der Index k , wenn man nach rechts geht. In der ersten Spalte dieser Tafel steht sehr häufig die Folge der Inputdaten für das Extrapolationsverfahren.

Es gibt nun meist Rekursionen, die bestimmte Elemente dieser Tafel miteinander verknüpfen.

Wir diskutieren als Beispiel Rekursionen der Form

$$T_n^{(k)} = f_n^{(k)}(T_n^{(k-1)}, T_{n+1}^{(k-1)}). \tag{2.13}$$

Dies ergibt ein Rekursionsschema mit Dreiecksgestalt

$$\begin{array}{cc}
 T_n^{(k-1)} & T_n^{(k)} \\
 T_{n+1}^{(k-1)} &
 \end{array} \tag{2.14}$$

Ist also die erste Spalte gegeben, so kann man sukzessive alle Elemente der zweiten Spalte berechnen und so weiter.

Man kann aber auch aus den Werten $T_{n-j}^{(j)}$, $0 \leq j \leq n$ einer Gegendiagonalen alle Tafeleinträge der benachbarten Gegendiagonale $T_{n+1-j}^{(j)}$, $0 \leq j \leq n+1$ berechnen, wenn man entweder $T_{n+1}^{(0)}$ oder $T_0^{(n+1)}$ kennt.

Ausgehend von den $n+1$ Werten $T_0^{(0)}, \dots, T_n^{(0)}$ der ersten Spalte kann man alle transformierten Werte in der linken oberen Ecke der Tafel berechnen, die durch die Werte $T_n^{(0)}, T_{n-1}^{(1)}, \dots, T_1^{(n-1)}, T_0^{(n)}$ in einer Gegendiagonalen begrenzt ist. Der Wert $T_0^{(n)}$ nutzt demnach den Informationsgehalt dieser $n+1$ Elemente der ersten Spalte am besten aus.

Entsprechend benützt man häufig Folgentransformationen der Struktur

$$\{s_n\} \longrightarrow \{T_0^{(n)} = T_0^{(n)}(s_0, \dots, s_n)\}, \tag{2.15}$$

im Falle von dreieckigen Rekursionsschemata.

Programmtechnisch hat das zur Folge, daß man jeweils nur die Werte in geeigneten Gegendiagonalen abspeichern muß, um aus einem weiteren Element der ursprünglichen

Folge die nächste Gegendiagonale und damit das nächste Element der transformierten Folge zu berechnen.

Sind die Rekursionsschemata nicht von Dreiecksstruktur, so sind häufig analoge Vorgehensweisen möglich, die allerdings etwas komplizierter zu programmieren sind. Wir verweisen auf den Abschnitt 5.1.6, in dem ein Beispiel ausführlich behandelt wird, sowie auf die Literatur [368, 59].

2.2 Algorithmen

Wir besprechen einige wichtige Extrapolationsalgorithmen. Wir benutzen die Schreibweise für das jeweilige Verfahren, die in der Literatur vorherrscht. Insbesondere wird häufig — im Gegensatz zur Indexanordnung wie in Gl. (2.11) — der Index n , der die transformierte Folge numeriert, oben angebracht.

2.2.1 E -Algorithmus

Viele bekannte Extrapolationsverfahren werden auf der Grundlage von Modellfolgen hergeleitet. Eine sehr allgemeine Modellfolge ist

$$\sigma_n = \sigma + \sum_{j=1}^k a_j g_j(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, k \in \mathbb{N}, \quad (2.16)$$

mit dem (Anti-)Limes σ , reellen oder komplexen Konstanten a_j , die die Rolle der zu eliminierenden Koeffizienten spielen, sowie Funktionen $g_j(n)$, die den Parametern entsprechen. Die $g_j(n)$ sind dabei Nullfolgen in n , falls die Modellfolge konvergiert. Schreibt man diese Gleichung für $k+1$ aufeinanderfolgende Folgeelemente $\sigma_n, \dots, \sigma_{n+k}$ nieder, so erhält man ein lineares Gleichungssystem für die Unbekannten σ und a_1, \dots, a_k . Die Lösung für σ kann man als Quotient zweier Determinanten darstellen:

$$\sigma = \frac{\begin{vmatrix} \sigma_n & \cdots & \sigma_{n+k} \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{vmatrix}} \quad (2.17)$$

Anwendung auf eine Problemfolge $\{s_n\}$ liefert nun eine Folgentransformation

$$E_k^{(n)} = \frac{\begin{vmatrix} s_n & \cdots & s_{n+k} \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{vmatrix}} \quad (2.18)$$

Diese Folgentransformation hat nach Konstruktion als Kern genau die Modellfolge (2.16). Die Transformation ist bekannt als E -Algorithmus, der von verschiedenen Autoren entwickelt und in allgemeinerer Weise von Håvie [154] und Brezinski [52] studiert wurde. Diese Folgentransformation ist auch als Brezinski–Håvie–Protokoll bekannt [394, Kap. 10]. Eine gute Einführung findet man im Buch von Brezinski und Redivo Zaglia [59, Abschn. 2.1]. Man vergleiche auch [60]. Viele andere Extrapolationsverfahren sind Spezialfälle des E -Algorithmus.

Die numerische Berechnung der Transformierten $E_k^{(n)}$ stützt sich nicht auf die direkte Auswertung der Determinanten, sondern kann wesentlich effizienter und stabiler über Rekursionen erfolgen. Dazu kann man den ursprünglichen Algorithmus von Brezinski [59, S. 58f]

$$E_0^{(n)} = s_n, \quad g_{0,i}^{(n)} = g_i(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad i \in \mathbb{N} \quad (2.19a)$$

$$E_k^{(n)} = E_{k-1}^{(n)} - \frac{E_{k-1}^{(n+1)} - E_{k-1}^{(n)}}{g_{k-1,k}^{(n+1)} - g_{k-1,k}^{(n)}} \cdot g_{k-1,k}^{(n)} \quad (2.19b)$$

$$g_{k,i}^{(n)} = g_{k-1,i}^{(n)} - \frac{g_{k-1,i}^{(n+1)} - g_{k-1,i}^{(n)}}{g_{k-1,k}^{(n+1)} - g_{k-1,k}^{(n)}} \cdot g_{k-1,k}^{(n)}, \quad i = k+1, k+2, \dots \quad (2.19c)$$

verwenden. Dabei erfordert die rekursive Berechnung der $E_k^{(n)}$ also die Hilfsgrößen $g_{k,i}^{(n)}$, die man über ein relativ kompliziertes Rekursionsschema von Hilfsregeln aus den $g_j(n)$ berechnen muß.

Weniger Operationen für die Berechnung der $E_k^{(n)}$ erfordert der Algorithmus von Ford und Sidi [123], der allerdings im Gegensatz zum Brezinski-Algorithmus die Kenntnis der

Größen $g_{k+1}(n), \dots, g_{k+1}(n+k)$ voraussetzt. Dabei definiert man

$$\Psi_k^{(n)}(u) = \frac{\begin{vmatrix} u_n & \dots & u_{n+k} \\ g_1(n) & \dots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \dots & g_k(n+k) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} g_{k+1}(n) & \dots & g_{k+1}(n+k) \\ g_1(n) & \dots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \dots & g_k(n+k) \end{vmatrix}} \quad (2.20)$$

für jede Folge $\{u_0, u_1, \dots\}$ wobei die $g_i(n)$ unverändert bleiben sollen, selbst wenn sie von den u_n abhängen und die u_n geändert werden. Dann gilt

$$E_k^{(n)} = \frac{\Psi_k^{(n)}(s)}{\Psi_k^{(n)}(1)}, \quad (2.21)$$

wobei die Ψ rekursiv mittels

$$\Psi_k^{(n)}(u) = \frac{\Psi_{k-1}^{(n+1)}(u) - \Psi_{k-1}^{(n)}(u)}{\Psi_{k-1}^{(n+1)}(g_{k+1}) - \Psi_{k-1}^{(n)}(g_{k+1})} \quad (2.22)$$

berechnet werden können.

Selbst bei Verwendung des Ford-Sidi-Algorithmus handelt es sich um numerisch relativ aufwendige Rekursionsverfahren. Durch Spezialisierung der $g_j(n)$ erhält man viele einfachere Transformationen, für die jeweils ein wesentlich einfacheres Rekursionsschema angegeben werden kann.

2.2.2 Shanks-Transformation und ϵ -Algorithmus

Ein wichtiger Spezialfall des E -Algorithmus ist die Shanks-Transformation [314], die durch

$$e_k(s_n) = \frac{\begin{vmatrix} s_n & \dots & s_{n+k} \\ \Delta s_n & \dots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \dots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \Delta s_n & \dots & \Delta s_{n+k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta s_{n+k-1} & \dots & \Delta s_{n+2k-1} \end{vmatrix}} \quad (2.23)$$

definiert ist. Sie ergibt sich für $g_j(n) = \Delta s_{n+j-1}$, wobei der Differenzenoperator Δ gemäß

$$\Delta f(n) = f(n+1) - f(n) \quad (2.24)$$

auf n wirkt.

Rekursiv und ökonomisch kann man die Shanks-Transformation durch den ϵ -Algorithmus von Wynn [399] berechnen. Dieser ist durch das Rekursionsschema

$$\begin{aligned} \epsilon_{-1}^{(n)} &= 0, & \epsilon_0^{(n)} &= s_n, \\ \epsilon_{k+1}^{(n)} &= \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + 1/[\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}] \end{aligned} \quad (2.25)$$

definiert. Die Elemente der ϵ -Tafel mit ungeraden unteren Indizes sind Hilfsgrößen, die mit geraden Indizes sind die eigentlich interessierenden Größen, die mit den Shanks-Transformierten über

$$\epsilon_{2k}^{(n)} = e_k(s_n) \quad (2.26)$$

verknüpft sind. Außerdem gilt

$$\epsilon_{2k+1}^{(n)} = 1/e_k(\Delta s_n). \quad (2.27)$$

Die Shanks-Transformation ist exakt für Modellfolgen der Form

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{k-1} c_j \Delta s_{n+j}. \quad (2.28)$$

Damit hängt zusammen, daß der ϵ -Algorithmus bzw. die Shanks-Transformation für Folgen exakt sind, deren Terme sich als Linearkombinationen von Potenzen λ_j^n , $\lambda_j \in \mathbb{C}$, mit polynomialen Koeffizienten darstellen lassen. Genau faßt dies der folgende Satz [59, Theorem 2.18].

Satz 2.1

Eine notwendige und hinreichende Bedingungen, daß für alle n die Beziehung $s = e_k(s_n)$ gilt, ist, daß es Konstanten a_0, a_1, \dots, a_k mit $a_k \neq 0$ und $a_0 + \dots + a_k \neq 0$ gibt, so daß für alle n

$$a_0(s_n - s) + \dots + a_k(s_{n+k} - s) = 0 \quad (2.29)$$

gilt, oder in anderen Worten, daß

$$\begin{aligned} s_n &= s + \sum_{i=1}^p A_i(n) r_i^n + \sum_{i=0}^m c_i \delta_{in} \\ &+ \sum_{i=p+1}^q [B_i(n) \cos(b_i n) + C_i(n) \sin(b_i n)] \exp(w_i n) \end{aligned} \quad (2.30)$$

mit $r_i \neq 1$ für $i = 1, \dots, p$ erfüllt ist, wobei A_i, B_i und C_i Polynome in n sind, so daß, falls d_i für $i = 1, \dots, p$ gleich dem Grad von A_i plus Eins und für $i = p+1, \dots, q$ gleich dem Maximum der Grade von B_i und C_i plus Eins ist, die Beziehung

$$m + \sum_{i=1}^p d_i + 2 \sum_{i=p+1}^q d_i = k - 1 \quad (2.31)$$

gilt, mit der Konvention $m = -1$, wenn es keinen Term im δ_{in} gibt (Kronecker-Symbol).

Zusätzlich kann man die Shanks-Transformation, und demnach auch den ϵ -Algorithmus, verwenden, um die obere Hälfte der Padé-Tafel über [314], [399]

$$e_k(f_n(z)) = [n + k/k]_f(z), \quad (k \geq 0, n \geq 0) \quad (2.32)$$

zu berechnen. Das bedeutet, daß man die Partialsummen

$$f_n(z) = \sum_{j=0}^n c_j z^j \quad (2.33)$$

der Potenzreihe einer Funktion $f(z)$ als Folgeelemente s_n nimmt und als Eingabedaten für die Shanks-Transformation beziehungsweise (in der Praxis) für den ϵ -Algorithmus verwendet. Als Ergebnis erhält man rationale Funktionen, die Padé-Approximationen von $f(z)$, die als Quotient zweier Polynome $p_\ell(z)$ und $q_m(z)$ vom Grade ℓ beziehungsweise m gemäß

$$[\ell/m]_f(z) = p_\ell(z)/q_m(z), \quad (2.34)$$

gegeben sind, wobei die Taylor-Reihen von f und $[\ell/m]_f$ soweit wie möglich übereinstimmen. Es gilt also

$$f(z) - p_\ell(z)/q_m(z) = O(z^{\ell+m+1}). \quad (2.35)$$

Die Bedeutung von Padé-Approximationen und anderen rationalen Approximationen liegt darin, daß sie einen praktischen Weg für die analytische Fortsetzung von Potenzreihen außerhalb ihres Konvergenzkreises bieten. Außerdem kann man derartige Approximationen benutzen, um die Singularitätenstruktur von $f(z)$ durch die Pole der rationalen Approximationen zu nähern.

Eine Modifikation des ϵ -Algorithmus ist der θ -Algorithmus von Brezinski [46], der sowohl für lineare als auch für logarithmische Konvergenz nützlich ist.

2.2.3 Aitken-Verfahren

Der Spezialfall $\epsilon_2^{(n)} = e_1(s_n)$ ist identisch mit der Δ^2 -Methode von Aitken [4]

$$s_n^{(1)} = s_n - \frac{(s_{n+1} - s_n)^2}{s_{n+2} - 2s_{n+1} + s_n}. \quad (2.36)$$

Diese hat den Kern

$$s_n = s + c(s_{n+1} - s_n), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (2.37)$$

Iteration der Δ^2 -Methode liefert das iterierte Aitken-Verfahren [394, 368, 59]

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_0^{(n)} &= s_n, \\ \mathcal{A}_{k+1}^{(n)} &= \mathcal{A}_k^{(n)} - \frac{(\mathcal{A}_k^{(n+1)} - \mathcal{A}_k^{(n)})^2}{\mathcal{A}_k^{(n+2)} - 2\mathcal{A}_k^{(n+1)} + \mathcal{A}_k^{(n)}}. \end{aligned} \quad (2.38)$$

Das iterierte Aitken-Verfahren sowie der ϵ -Algorithmus beschleunigen lineare Konvergenz und sind unter Umständen auch für die Summation von alternierenden, divergenten Reihen verwendbar.

2.2.4 ρ -Algorithmus

Setzt man $g_{2i-1}(n) = x_n^{-i} s_n$ und $g_{2i}(n) = x_n^{-i}$ im E -Algorithmus, so erhält man den ρ -Algorithmus von Wynn [400], den man über die einfache Rekursion

$$\begin{aligned} \rho_{-1}^{(n)} &= 0, & \rho_0^{(n)} &= s_n, \\ \rho_{k+1}^{(n)} &= \rho_{k-1}^{(n+1)} + \frac{x_{n+k+1} - x_n}{\rho_k^{(n+1)} - \rho_k^{(n)}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

berechnen kann. Hierbei ist x_n eine Hilfsfolge, die für $n \rightarrow \infty$ divergiert. Man wählt häufig $x_n = n + 1$. Der scheinbar kleine Unterschied im Rekursionschema von ϵ - und ρ -Algorithmus ist mit gewaltigen Unterschieden in der Anwendbarkeit verknüpft. Im Gegensatz zum ϵ -Algorithmus beschleunigt der ρ -Algorithmus logarithmisch konvergente Folgen, versagt aber bei linear konvergenten Folgen und bei alternierenden divergenten Reihen.

Den Kern des ρ -Algorithmus bilden Modellfolgen der Form

$$s_n = \frac{Sx_n^k + a_1x_n^{k-1} + \dots + a_k}{x_n^k + b_1x_n^{k-1} + \dots + b_k} \quad (2.40)$$

mit Koeffizienten a_i und b_i . Der ρ -Algorithmus ist infolgedessen mit rationaler Extrapolation bei Unendlich verbunden.

2.2.5 Richardson-Verfahren

Betrachtet man die Modellfolge

$$\sigma_n = \sigma + a_1x_n + a_2x_n^2 + \dots + a_kx_n^k, \quad (2.41)$$

die einer polynomialen Extrapolation bei Null entspricht, so ergibt sich als Folgentransformation der Richardson-Extrapolationsprozeß [294]

$$\begin{aligned} T_0^{(n)} &= s_n, \\ T_k^{(n)} &= \frac{x_{n+k} T_{k-1}^{(n)} - x_n T_{k-1}^{(n+1)}}{x_{n+k} - x_n}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Das Richardson-Verfahren ergibt sich aus dem E -Algorithmus demnach für $g_i(n) = x_n^i$. Die Hilfsfolge x_n konvergiert dabei für $n \rightarrow \infty$ gegen Null. Man wählt häufig $x_n = 1/(n + 1)$.

Richardson-Verfahren und ρ -Algorithmus sind besonders für logarithmische Konvergenz geeignet.

2.2.6 BDG-Algorithmus und Osada-Verfahren

Als Modifikation des Aitken-Verfahrens für den Fall $\Delta s_n \sim An^{\theta-1}$ mit bekanntem Exponenten $\theta < 0$ (also für logarithmische Konvergenz) schlug Drummond [104] die Transformation

$$s'_n = s_n - \frac{\theta - 1}{\theta} \frac{\Delta s_{n-1} \Delta s_n}{\Delta^2 s_{n-1}} \quad (2.43)$$

vor, die Bjørstad, Dahlquist und Grosse [34] gemäß

$$\begin{aligned}\mathcal{B}_0^{(n)} &= s_n, \\ \mathcal{B}_{k+1}^{(n)} &= \mathcal{B}_k^{(n)} - \frac{2k+1-\theta}{2k-\theta} \frac{\Delta \mathcal{B}_k^{(n-1)} \Delta \mathcal{B}_k^{(n)}}{\Delta^2 \mathcal{B}_k^{(n-1)}}\end{aligned}\quad (2.44)$$

iterierten. Dies nennen wir den BDG-Algorithmus. Auf Arbeiten von Drummond [104] und Osada [268] fußt die folgende Modifikation des ρ -Algorithmus:

$$\begin{aligned}\tilde{\rho}_{-1}^{(n)} &= 0, \quad \tilde{\rho}_0^{(n)} = s_n, \\ \tilde{\rho}_{k+1}^{(n)} &= \tilde{\rho}_{k-1}^{(n+1)} + \frac{k-\theta}{\tilde{\rho}_k^{(n+1)} - \tilde{\rho}_k^{(n)}}.\end{aligned}\quad (2.45)$$

Dies nennen wir das Osada-Verfahren.

Den BDG-Algorithmus kann man auch durch Iteration der Osada-Transformation $\tilde{\rho}_2^{(n)}$ erhalten [370].

Den Exponenten θ kann man nötigenfalls zunächst als Grenzwert der Folge [104]

$$\theta_n = 1 + \frac{1}{\Delta(\Delta s_n / \Delta^2 s_n)}\quad (2.46)$$

bestimmen.

Diese Verfahren beschleunigen Folgen aus der Menge \mathbf{L} . Diese ist definiert als die Menge aller Folgen, die die Asymptotik

$$s_n \sim s + n^\theta (c_0 + c_1 n^{-1} + c_2 n^{-2} + \dots), \quad (n \rightarrow \infty)\quad (2.47)$$

mit $\theta < 0$ und $c_0 \neq 0$ besitzen. Für eine solche Folge gilt [34]

$$\mathcal{B}_k^{(n)} - s = O(n^{\theta-2k}), \quad (n \rightarrow \infty)\quad (2.48)$$

sowie [268]

$$\tilde{\rho}_{2k}^{(n)} - s = O((n+k)^{\theta-2k}), \quad (n \rightarrow \infty).\quad (2.49)$$

2.2.7 Levin-artige Verfahren

Wir kommen jetzt zur wichtigen Klasse der Levin-artigen Verfahren. Ihr Prototyp ist die Levin-Transformation [222]

$$\mathcal{L}_k^{(n)}(\beta, s_n, \omega_n) = \frac{\sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k}{j} \frac{(\beta+n+j)^{k-1}}{(\beta+n+k)^{k-1}} \frac{s_{n+j}}{\omega_{n+j}}}{\sum_{j=0}^k (-1)^j \binom{k}{j} \frac{(\beta+n+j)^{k-1}}{(\beta+n+k)^{k-1}} \frac{1}{\omega_{n+j}}},\quad (2.50)$$

oder gleichbedeutend

$$\mathcal{L}_k^{(n)}(\beta, s_n, \omega_n) = \frac{\Delta^k[(\beta + n)^{k-1} s_n / \omega_n]}{\Delta^k[(\beta + n)^{k-1} / \omega_n]}. \quad (2.51)$$

Wir verwenden die Schreibweise

$$u_k^{(n)}(\beta, s_n) = \mathcal{L}_k^{(n)}(\beta, s_n, (n + \beta)\Delta s_{n-1}) \quad (2.52)$$

für die u -Variante und

$$t_k^{(n)}(\beta, s_n) = \mathcal{L}_k^{(n)}(\beta, s_n, \Delta s_{n-1}) \quad (2.53)$$

für die t -Variante der Levin-Transformation. Die Modellfolge der Levin-Transformation ist

$$\sigma_n = \sigma + \omega_n(a_0 + a_1(n + \beta)^{-1} + \cdots + a_{k-1}(n + \beta)^{1-k}). \quad (2.54)$$

Demnach kann die Levin-Transformation als Spezialfall des E -Algorithmus für $g_j(n) = \omega_n(n + \beta)^{1-j}$ aufgefaßt werden.

Ebenfalls zur Klasse der Levin-artigen Verfahren gehört die Weniger-Transformation [368, Abschn. 8]

$$\mathcal{S}_k^{(n)}(\beta, s_n, \omega_n) = \frac{\Delta^k[(\beta + n)_{k-1} s_n / \omega_n]}{\Delta^k[(\beta + n)_{k-1} / \omega_n]}. \quad (2.55)$$

Dabei werden im wesentlichen nur alle Potenzen $(n + \beta)^j$ durch Pochhammer-Symbole $(n + \beta)_j$ ersetzt. Eine weitere Transformation ergibt sich bei Ersetzung durch $(-n - \beta)_j$ [368]. Diese Transformationen sind von besonderer Effizienz bei der Summation hochgradig divergenter Reihen.

Einfache Dreitermrekursionen für die Zähler und Nenner der Transformationen von Levin und Weniger findet man in der Literatur [368, 59].

Die $d^{(m)}$ -Transformationen wurden von Levin und Sidi [223] als Verallgemeinerung der u -Variante der Levin-Transformation eingeführt. Ford und Sidi haben gezeigt, wie man diese Transformationen rekursiv mit den $W^{(m)}$ -Algorithmen berechnen kann. [123] Wir beschreiben eine leicht modifizierte Variante der $d^{(m)}$ -Transformation [323]:

Sind $m \in \mathbb{N}$ und $R_l \in \mathbb{N}_0$ für $l \in \mathbb{N}_0$ mit $R_0 < R_1 < R_2 < \cdots$ gegeben und $\nu = (n_1, \dots, n_m)$ mit $n_j \in \mathbb{N}_0$. Dann ergibt die $d^{(m)}$ -Transformation eine Tafel von Näherungen $A_\nu^{(m,j)}$ für den (Anti-)Limes A einer Folge A_r mit Termen $u_0 = A_0$ und $u_r = A_r - A_{r-1}$ als Lösung des Gleichungssystems

$$A_{R_l} = A_\nu^{(m,j)} + \sum_{k=1}^m (R_l + \alpha)^k [\Delta^{k-1} u_{R_l}] \sum_{i=0}^{n_k} \frac{\bar{\beta}_{ki}}{(R_l + \alpha)^i}, \quad j \leq l \leq j + N, \quad (2.56)$$

mit $\alpha > 0$, $N = \sum_{k=1}^m n_k$ und den $N + 1$ Unbekannten $A_\nu^{(m,j)}$ und $\bar{\beta}_{ki}$. Die $[\Delta^k u_j]$ sind dabei über $[\Delta^0 u_j] = u_j$ und $[\Delta^k u_j] = [\Delta^{k-1} u_{j+1}] - [\Delta^{k-1} u_j]$ definiert. Meist werden alle n_k gleich gewählt und demnach $\nu = (n, n, \dots, n)$ gesetzt. Als transformierte Folge werden in diesem Fall die Elemente $A_{(n, \dots, n)}^{(m,0)}$ für $n = 0, 1, \dots$ gewählt. Die u -Variante der Levin-Transformation entspricht dann dem Spezialfall $m = 1$, $\alpha = \beta$ und $R_l = l$.

Die $d^{(m)}$ -Transformationen sind der wichtigste Spezialfall des von Sidi eingeführten generalisierten Richardson-Extrapolationsprozesses (GREP) [317, 318, 324].

Trotz der Indextransformation $l \rightarrow R_l$ kann man die $d^{(m)}$ -Transformationen auch als Spezialfall der E -Transformation ansehen, die dann auf der Folge $s_n = A_{R_n}$ operiert, wobei die $g_j(n)$ allerdings aus den höheren Differenzen von A_r für $r = R_l$ berechnet werden. Zum Beispiel verwendet man nicht $\Delta^2 s_{n-1} = A_{R_{n+1}} - 2A_{R_n} + A_{R_{n-1}}$, sondern $[\Delta u_{R_l}] = A_{R_{l+1}} - 2A_{R_l} + A_{R_{l-1}}$. Auf diesen feinen Unterschied sollen auch die eckigen Klammern um die Differenzen $[\Delta^k u_r]$ hinweisen. Diese Indextransformationen bewirken, daß nur eine Teilfolge von $\{A_r\}$ zur Berechnung der transformierten Folge verwendet wird. Dies kann verwendet werden, um die Stabilität der Transformation zu erhöhen.

Offensichtlich kann man derartige Indextransformation für alle Levin-artigen Transformationen verwenden. Dies werden wir später am Beispiel einer von uns eingeführten Transformation, der \mathcal{H} -Transformation diskutieren.

Die $d^{(m)}$ -Transformation wurde eingeführt, um die Konvergenz unendlicher Reihen zu beschleunigen, deren Terme u_r eine lineare Differenzgleichung m -ter Ordnung der Form

$$u_r = \sum_{k=1}^m p_k(r) \Delta^k u_r \quad (2.57)$$

erfüllen, wobei die Koeffizienten asymptotische Entwicklungen

$$p_k(r) \sim r^{i_k} \sum_{i=0}^{\infty} \frac{p_{ki}}{r^i}, \quad (r \rightarrow \infty) \quad (2.58)$$

besitzen, wobei die ganzen Zahlen i_k die Ungleichungen $i_k \leq k$ erfüllen. Dies reicht im wesentlichen aus, um

$$A_r \sim A + \sum_{k=1}^m r^{j_k} [\Delta^{k-1} u_r] \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\beta_{ki}}{r^i} \quad (2.59)$$

für $r \rightarrow \infty$ zu garantieren, wobei die ganzen Zahlen j_k die Ungleichungen $j_k \leq k$ erfüllen. [223, Theorem 2] In dieser asymptotischen Entwicklung erkennt man aber — abgesehen von Indextransformationen — im wesentlichen die ersten Terme aus Gl. (2.56).

2.2.8 Overholt-Verfahren

Das Overholt-Verfahren wird durch das Rekursionsschema

$$V_0^{(n)} = s_n, \quad (2.60a)$$

$$V_k^{(n)} = \frac{(\Delta s_{n+k-1})^k V_{k-1}^{(n+1)} - (\Delta s_{n+k})^k V_{k-1}^{(n)}}{(\Delta s_{n+k-1})^k - (\Delta s_{n+k})^k} \quad (2.60b)$$

für $k \in \mathbb{N}$ and $n \in \mathbb{N}_0$ definiert. Diese Rekursion hat die oben diskutierte Dreiecksstruktur.

Das Overholt-Verfahren ist für die Beschleunigung von Iterationsfolgen $s_{n+1} = f(x_n)$ von Bedeutung. Es gilt der folgende Satz:

Satz 2.2

[59, Theorem 2.33] Wenn das Overholt-Verfahren auf eine Folge s_n mit (Anti-)Limes s angewandt wird, für die

$$d_{n+1} = a_1 d_n + a_2 d_n^2 + \dots + a_r d_n^r + \dots \quad (2.61)$$

mit $d_n = s_n - s$ und $a_1 \neq 1$ gilt, dann gilt für alle n und k

$$V_k^{(n)} = s + a_{k,k} d_n^{k+1} + a_{k,k+1} d_n^{k+2} + \dots \quad (2.62)$$

mit $a_{0,i} = a_i$ und

$$a_{k+1,k+1} = \frac{a_1^{k+1}}{1 - a_1^{k+1}} [(a_1 - 1)a_{k,k+1} - (k+1)a_2 a_{k,k}]. \quad (2.63)$$

Dies hängt mit Iterationsfolgen folgendermaßen zusammen: Die Konvergenz gegen den Fixpunkt $s_* = f(s_*)$ kann man für genügend glatte Funktionen f durch Taylor-Entwicklung gemäß

$$s_{n+1} = f(s_n) = f(s) + f'(s)(s_n - s) + \dots + \frac{f^{(r)}(s)}{r!}(s_n - s)^r + \dots \quad (2.64)$$

studiert werden. Dies kann als nichtlineare Differenzgleichung erster Ordnung für den Fehler $d_n = s_n - s$ gemäß

$$d_{n+1} = a_1 d_n + a_2 d_n^2 + \dots + a_r d_n^r + \dots \quad (2.65)$$

aufgefaßt werden, wobei $a_1 = f'(s)$ gilt und die Konstanten a_r unabhängig von n sind. Wie von Walz [363] gezeigt, impliziert dies die asymptotische Entwicklung

$$d_n = c_1 a_1^n + c_2 a_1^{2n} + \dots, \quad (n \rightarrow \infty) \quad (2.66)$$

mit von n unabhängigen Konstanten c_ν . Die Iteration konvergiert also, falls $-1 < f'(s) = a_1 < 1$ gilt und der Startwert s_0 genügend dicht am Fixpunkt s liegt.

Wie Satz 2.2 zeigt, kann man durch das Overholt-Verfahren also die führenden Fehlerterme eliminieren und so die Konvergenz der Fixpunktiterationen beschleunigen. Es gilt näherungsweise

$$V_k^{(n)} - s \approx a_{k,k} c_1^{k+1} a_1^{(k+1)n} \quad (2.67)$$

für große n , verglichen mit

$$s_n - s \approx c_1 a_1^n. \quad (2.68)$$

Demnach ergibt sich

$$\frac{V_k^{(n)} - s}{s_n - s} \approx C_k a_1^{k \cdot n} \quad (2.69)$$

mit $C_k = a_{k,k} c_1^k$. Ist der Fixpunkt stabil, so gilt $|a_1| < 1$ und die Konvergenz für $n \rightarrow \infty$ wird desto mehr beschleunigt, je größer k ist.

Allerdings ist diese Abschätzung für festes k und laufendes n in der Praxis nicht so entscheidend, da man dort festes n und laufendes k betrachtet. Denn man verwendet meist $V_0^{(0)}, V_1^{(0)}, V_2^{(0)}, \dots$ als transformierte Folge. Dies entspricht der Folgentransformation

$$\{s_n\} \longrightarrow \{V_n^{(0)} = V_n^{(0)}(s_0, \dots, s_{n+1})\} \quad (2.70)$$

Dadurch wird der Informationsgehalt der Iterationsfolge maximal ausgenutzt, was in vielen Fällen zu verbesserter Konvergenz führt.

Kapitel 3

Iterative Folgentransformationen

In diesem Kapitel stellen wir die Ergebnisse von [160, 164, 163] vor.

Viele bekannte Folgentransformationen kann man als Spezialfall des E -Algorithmus verstehen. Der Kern dieser Transformationen ist von der Form der Gl. (2.16) für bestimmte Funktionen $g_j(n)$, die häufig explizit bekannt sind. Dann kann man stets den E -Algorithmus für die Berechnung verwenden, der allerdings ein relativ kompliziertes Rekursionschema besitzt und damit numerisch relativ aufwendig ist. Deshalb ist es stets vorteilhaft, bei spezieller Form der $g_j(n)$ nach alternativen Algorithmen zu suchen, die eine einfachere Berechnung erlauben.

Ein anderer Zugang zu Folgentransformationen ist die Iteration einfacher Folgentransformationen. Dann erhält man numerisch effiziente Verfahren. Es treten dabei allerdings zwei Probleme auf. Zum einen ist für die meisten dieser iterativen Folgentransformationen der Kern unbekannt.

Zum anderen gibt es methodische Schwierigkeiten. Es gibt in der Regel verschiedene Möglichkeiten, die Iteration zu führen und in jeder Stufe der Iteration eine einfache Folgentransformation zu wählen. Diese werden im Abschnitt 3.1 genauer dargestellt.

Im allgemeinen sind für die zugrundeliegenden einfachen Transformationen die Kerne bekannt. Bei der Iteration der Transformationen wurde bisher nicht bedacht, wie die Kerne der verschiedenen Transformationsstufen in Beziehung gebracht werden können, um eine problemangepaßte iterierte Folgentransformation zu erhalten. Hier setzt nun das Prinzip von der hierarchischen Konsistenz an, in dem man Hierarchien von Modellfolgen betrachtet und auf jeder Stufe der Iteration eine einfache Folgentransformation wählt, die zur Hierarchie paßt. In dieser Weise kann man die oben besprochenen methodischen Schwierigkeiten bei der Konstruktion iterierter Folgentransformationen lösen oder zumindest auf das einfachere Problem reduzieren, geeignete Hierarchien zu finden.

Das Konzept der hierarchischen Konsistenz wird in Abschnitt 3.2 eingeführt. Es wurde konsequent durchgeführt für die vom Autor eingeführte \mathcal{J} -Transformation, die in Abschnitt 3.3 im Detail vorgestellt wird. Diese Transformation hängt von Hilfsfolgen $\{r_n^{(k)}\}_{n=0}^{\infty}$ mit $k \in \mathbb{N}_0$ ab. Die Hilfsfolgen sind verknüpft mit der Wahl der Hierarchie der Modellfolgen. Für jede Wahl der Hilfsfolge erhält man andere Hierarchien und damit andere Formen der \mathcal{J} -Transformation, die sich hinsichtlich ihrer numerischen Eigenschaften und

ihrem Anwendungsbereich unterscheiden. Ferner hängt die \mathcal{J} -Transformation von Restabschätzungen ω_n ab. Für verschiedene Problemklassen sind vernünftige Restabschätzungen bekannt. Die Verwendung verschiedener Restabschätzung führt zu einer Anzahl von Varianten für jeder spezielle, einer Hierarchie angepaßte \mathcal{J} -Transformation. Es verwundert daher nicht, daß sich die \mathcal{J} -Transformation als eine sehr flexible und allgemeine iterative Folgentransformation herausstellt. Die \mathcal{J} -Transformation subsummiert eine ganze Klasse von Transformationen. Viele Spezialfälle können in einer natürlichen Weise eingeführt werden.

Die \mathcal{J} -Transformation erlaubt aufgrund ihrer Konstruktion die Abtrennung der Frage der problemangepaßten Restabschätzung von der Frage nach einer adäquaten Wahl der Hierarchie.

Es stellt sich heraus, daß man den Kern der \mathcal{J} -Transformation allgemein angeben kann. In die entsprechende Darstellung gehen nur die Hilfsfolgen $\{r_n^{(k)}\}$ und die Restabschätzungen ω_n ein, nicht aber irgendwelche Transformationen aus anderen Stufen der Iteration. Damit ist auch der Weg frei für eine theoretische Analyse der Konvergenzbeschleunigungseigenschaften der \mathcal{J} -Transformation. Ferner kann man auch Determinantendarstellungen für die \mathcal{J} -Transformation finden, die wichtige Hilfsmittel für ein mathematisches Verständnis der Eigenschaften der Transformation darstellen. Als Folgerung ergibt sich ein relativ allgemeiner Zugang für die Bestimmung solcher Darstellungen für iterative Folgentransformation.

Durch die Methode der hierarchischen Konsistenz ergibt sich ein formaler Rahmen für die Konstruktion von iterativen Folgentransformationen. Je nach Wahl der zugrundeliegenden einfachen Folgentransformation ergeben sich mehr oder weniger verschiedene Klassen von Folgentransformationen, die von ähnlicher Allgemeinheit wie die \mathcal{J} -Transformation sein sollten. Die Methode der hierarchischen Konsistenz ist also von allgemeiner Natur. Im Falle der \mathcal{J} -Transformation erlaubt sie, die Eigenschaften großer Klassen von iterativen Folgentransformationen gleichzeitig zu diskutieren. Für alle Transformationen, die in das Schema passen, erhält man Ausdrücke für den Kern, Determinantendarstellungen, verschiedene rekursive Algorithmen sowie eine relativ grundlegende Konvergenzanalyse ohne großen zusätzlichen Aufwand.

Zusätzlich zu diesen mehr theoretischen Vorteilen stellt sich heraus, daß die Wahl problemangepaßter Hierarchien aufgrund einfacher, heuristischer Überlegungen möglich ist. Als Konsequenz erhält man Algorithmen, die wenig numerischen Aufwand erfordern und trotzdem sehr gute Konvergenzbeschleunigungsergebnisse vorweisen können.

3.1 Zur Konstruktion iterativer Folgentransformationen

Viele bekannte Folgentransformationen wurden auf der Basis von Modellfolgen erhalten. In dieser Zugangsweise konstruiert man eine Methode so, daß man mit einer endlichen Anzahl von Operationen den Limes oder Antilimes der Modellfolge aus einer Anzahl ih-

rer Elemente exakt berechnen kann. In vielen Fällen hängen die Modellfolgen linear von Koeffizienten ab, die bei der Berechnung eliminiert werden. Dann erhält man als Folge der Konstruktion einen linearen Raum von Modellfolgen, den Kern. In Verallgemeinerung dieser Bezeichnungsweise versteht man unter dem Kern einer Folgentransformation die Menge aller Folgen, für die Transformation exakt ist. Dieser Raum von Folgen ist also nicht notwendig linear. Die Methode liefert also das exakte Resultat für Folgen aus diesem Raum. Wenn man sie auf andere Folgen anwendet, ergibt sich eine Folgentransformation. Solche eine Folgentransformation liefert eine neue Folge, die dann gut konvergieren sollte, wenn eine Modellfolge des Kerns ein gutes Modell für die ursprüngliche Folge ist.

Eine Folgentransformation sollte demnach um so allgemeiner anwendbar sein, je umfassender ihr Kern ist. Deshalb verwendet man häufig Modellfolgen, die von vielen Parametern abhängen.

Alternativ kann man viel einfachere Modellfolgen betrachten, die zu sehr einfachen Folgentransformationen der Form

$$s_n^{(1)} = f(\{s_n\}), \quad n \in \mathbb{N}_0 \tag{3.1}$$

gehören. Hier ist f eine einfache Funktion, die von einer kleinen Zahl von Elementen der ursprünglichen Folge $\{s_n\}$ abhängt und daraus ein Element der transformierten Folge $\{s_n^{(1)}\}$ berechnet. Dann kann man in naheliegender Weise die einfache Folgentransformation iterieren, indem man

$$s_n^{(k+1)} = f(\{s_n^{(k)}\}), \quad (k \geq 1) \tag{3.2}$$

setzt.

Ein einfaches Beispiel ist die Iteration der berühmten Δ^2 -Methode von Aitken [4]. Man erhält so das Rekursionsschema (2.38), mittels dessen man die transformierten Größen $\mathcal{A}_k^{(n)}$ durch k -fache Iteration der Transformation (2.36) aus einer gegebenen Folge $\{s_n\}$ berechnet.

Man beachte, daß die Anordnung der Indizes bezüglich Hoch- und Tiefstellung in Gln. (2.38) und (3.2) verschieden ist. Die Anordnung in Gl. (3.2) entspricht mehr der Vorstellung, daß man Abbildungen bzw. Transformationen von Folgen hat, $s_n, s'_n = s_n^{(1)}, s''_n = s_n^{(2)}, \dots$, während die Anordnung in Gl. (2.38) die ist, die in der Literatur über das iterierte Aitkenverfahren meist verwendet wird. Hier und im folgenden benutzen wir die Anordnung aus Gl. (3.2) außer für etablierte Verfahren. Für diese benutzen wir die in der Literatur übliche Anordnung. Wir bemerken, daß eine in diesem Punkt ähnliche Vorgehensweise in dem Buch von Wimp verwendet wurde, da dort auch beide Anordnungsweisen gemischt verwendet werden (vgl. [394, S. 73, Gl. (1), S. 138, Gl. (1)]).

Wir bemerken, daß die Δ^2 -Methode aus Gl. (2.36) exakt ist für die sehr einfachen Modellfolgen, die in Gl. (2.37) angegeben sind. Diese Modellfolgen enthalten eine einzige Konstante in linearer Weise, der Kern ist ein linearer Raum.

Wenn das iterierte Aitken-Verfahren (2.38) eine gegebene Folge $\{s_n\}$ gut extrapolieren soll, sollte die Modellfolge (2.37) für alle Stufen der Iteration ein gutes Modell sein:

$$\mathcal{A}_k^{(n)} = s + c_k (\mathcal{A}_k^{(n+1)} - \mathcal{A}_k^{(n)}) + e_k^{(n)}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \tag{3.3}$$

Hier bedeutet $e_k^{(n)}$ einen als klein angenommenen Fehlerterm. Wenn auf irgendeiner Stufe k der Iteration $e_k^{(n)}$ für alle n verschwindet, dann sind die Transformationen $\mathcal{A}_{k+l}^{(n)}$ für $l \geq 1$ exakt. In der Praxis ist ein solches Resultat einer exakten Beweisführung relativ schwer zugänglich, da geschlossene Ausdrücke für die höheren Iterierten $\mathcal{A}_k^{(n)}$ (also solche mit höheren Werten von k) normalerweise nicht verfügbar sind. Dies zeigt, daß es normalerweise sehr schwierig ist, explizite Darstellungen für den Kern iterierter Algorithmen zu finden. Man vergleiche dazu auch [62].

Zusätzlich ist die Konstruktion der iterierten Folgentransformation nicht eindeutig vorgegeben, wenn man nur die zugrundeliegende einfache Transformation (3.1) als Anhaltspunkt hat. Anstelle der Definition (3.2) für die iterierte Transformation kann man mit gleicher Berechtigung auch eine explizit k -abhängige Regel

$$s_n^{(k+1)} = f_k(\{s_n^{(k)}\}), \quad k \in \mathbb{N}_0 \quad (3.4)$$

verwenden, solange nur $f_0 = f$ gilt. Beispielsweise könnte man anstelle des iterierten Aitken-Verfahrens (2.38) modifizierte iterative Algorithmen der Form

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{A}}_0^{(n)} &= s_n, \\ \overline{\mathcal{A}}_{k+1}^{(n)} &= \overline{\mathcal{A}}_k^{(n)} - X_k \frac{(\overline{\mathcal{A}}_k^{(n+1)} - \overline{\mathcal{A}}_k^{(n)})^2}{\overline{\mathcal{A}}_k^{(n+2)} - 2\overline{\mathcal{A}}_k^{(n+1)} + \overline{\mathcal{A}}_k^{(n)}} \end{aligned} \quad (3.5)$$

verwenden, die von weiteren Parametern X_k abhängen, wenn nur $X_0 = 1$ gilt. Man könnte zum Beispiel $X_k = (2k + 1)/(k + 1)$ verwenden. Ob diese modifizierten Algorithmen für bestimmte Probleme nützlich sind oder nicht, kann man nicht *a priori* entscheiden. Interessanterweise wurden Algorithmen mit einer zu Gl. (3.5) sehr ähnlichen Struktur schon untersucht [34, 370].

Weitere Vieldeutigkeiten bei der Konstruktion iterativer Folgentransformationen können in zwei Fällen entstehen:

1. Es gibt verschiedene Formeln, die für die Berechnung der zugrundeliegenden Transformation zueinander äquivalent sind, die aber zu verschiedenen iterierten Algorithmen führen.
2. Die zugrundeliegende Folgentransformation hängt von n direkt oder indirekt über zusätzliche Hilfsfolgen ab.

Beispiele für solche Vieldeutigkeiten findet man in [370].

Iterative Folgentransformationen sind oft sehr einfach und schnell zu berechnen. Sie sind flexibel, da sie auf einfachen Modellen basieren, die man leicht an spezielle Probleme anpassen kann. Iterierte Transformationen haben auch eine einfache Konvergenztheorie, sofern man sich auf eine einzige Stufe der Iteration beschränkt. Dies kann man sich am Beispiel des Kerns (2.37) der Δ^2 -Methode von Aitken klarmachen. Die Konstruktion von iterierten Transformationen ist jedoch nicht eindeutig, explizite Formeln für den Kern der vielstufigen iterierten Folgentransformation sind in der Regel schwer zu finden und Konvergenzbeweise sind ebenfalls schwierig.

Man kann also in Bezug auf diese Eigenschaften iterierten Folgentransformationen einerseits und Folgentransformationen auf der Basis der Modellfolge (2.16) andererseits mehr oder weniger komplementäre Eigenschaften zusprechen.

Man sollte sich in diesem Zusammenhang vor Augen halten, daß es keine universelle Folgentransformation gibt, die für jede gegebene Folge zur Konvergenzbeschleunigung führt. Die Existenz einer solchen universellen Transformation wäre ein Widerspruch zur Theorie der Remanenz [89]. Trotzdem kann man sich die Frage stellen, ob es möglich ist, eine iterative, vom Rechenaufwand her einfache iterierte Folgentransformation zu finden, die einen großen Anwendungsbereich hat (indem man geeignete Varianten der Transformation betrachtet), und für die man den Kern explizit angeben kann. So könnte man die Vorteile beider oben beschriebener Verfahrensweisen kombinieren. Dies ist mit der Einführung der \mathcal{J} -Transformation gelungen, die im Abschnitt 3.3 ausführlich besprochen wird. Doch zuvor soll das Konzept der hierarchischen Konsistenz von iterierten Folgentransformationen eingeführt werden, mit dem man die Vieldeutigkeitsproblematik bei der Konstruktion solcher Transformationen angehen kann.

3.2 Hierarchische Konsistenz

Dieser Abschnitt stützt sich im wesentlichen auf [160].

Wie im Abschnitt 3.1 gezeigt, ist das Hauptproblem bei der Bestimmung iterativer Folgentransformation, wie die zugrundeliegende einfache Folgentransformation iteriert werden soll. Es sollte eine Rechtfertigung dafür geben, die einfache Transformation wieder und wieder zu benutzen. Es kann nötig sein, Parameter der einfachen Transformation abzuändern und so eigentlich auf jeder Stufe der Iteration eine andere Variante der einfachen Transformation zu benutzen. Man kann nun herauszufinden versuchen, ob die einmal transformierte Folge von ähnlicher Form ist wie die Modellfolge, für die die zugrundeliegende einfache Folgentransformation exakt ist. Um diese Frage genauer zu untersuchen, verallgemeinern wir die Modellfolge zu einer Hierarchie von Modellfolgen. Modellfolgen, die höher in der Hierarchie sind, sind komplizierter und enthalten mehr Parameter als die weiter unten. Eine Folgentransformation, die durch Iteration einer zugrundeliegenden, parameterabhängigen einfachen Transformation entsteht, heißt "hierarchisch konsistent" oder "konsistent zur Hierarchie", wenn sie die folgenden Bedingungen erfüllt:

1. Die zugrundeliegende einfache Transformation ist exakt für die Modellfolgen zuun-
terst in der Hierarchie.
2. Die Anwendung einer geeigneten Variante der einfachen Transformation auf eine
Modellfolge, die höher in der Hierarchie steht, führt zu einer einfacheren Modellfolge,
die tiefer in der Hierarchie steht. Deren Parameter werden "renormierte Parameter"
genannt.

Durch die wiederholte Anwendung der einfachen Transformation, jeweils mit der Iterationsstufe angepaßten Parametern, kann man also in der passenden Hierarchie von Modellfolgen zu immer einfacheren Modellfolgen hinuntersteigen, bis man schließlich bei der

Modellfolge der einfachen Transformation selbst ankommt. Verfolgt man jetzt den Weg der Iteration rückwärts, so kommt man zu Aussagen über die komplizierteren Modellfolgen, für die die iterierte Folgentransformation exakt ist.

Dies wird im folgenden formal beschrieben. Sei $\{\sigma_n(\vec{c}, \vec{p})\}_{n=0}^{\infty}$ eine konvergente Modellfolge, die abhängig von einem Koeffizientenvektor $\vec{c} \in \mathbb{C}^a$ und weiteren Parametern \vec{p} ist. Ihr Grenzwert $\sigma(\vec{p})$ sei von \vec{c} unabhängig und mittels der einfachen Folgentransformation

$$T(\vec{p}) : \{\sigma_n(\vec{c}, \vec{p})\}_{n=0}^{\infty} \longrightarrow \{\sigma(\vec{p})\}_{n=0}^{\infty} \quad (3.6)$$

exakt berechenbar. Sei $\{\{\sigma_n^{(\ell)}(\vec{c}^{(\ell)}, \vec{p}^{(\ell)}) | \vec{c} \in \mathbb{C}^{a^{(\ell)}}\}_{n=0}^{\infty}\}_{\ell=0}^L$ eine Familie von Modellfolgen, so daß die Dimensionen $a^{(\ell)}$ der Koeffizientenräume streng monoton mit dem Index ℓ wachsen. Außerdem seien die Folgen mit kleineren Indizes ℓ durch die mit größeren Indizes darstellbar: Für gegebenes $\ell < L$ und jedes $\ell' > \ell$ und $\ell' \leq L$ sei jede Folge $\{\sigma_n^{(\ell)}(\vec{c}^{(\ell)}, \vec{p}^{(\ell)})\}$ als eine Modellfolge $\{\sigma_n^{(\ell')}(\vec{c}^{(\ell')}, \vec{p}^{(\ell')})\}$ darstellbar, wobei man $\vec{c}^{(\ell')}$ aus $\vec{c}^{(\ell)}$ durch die natürliche Einbettung $\mathbb{C}^{a^{(\ell)}} \rightarrow \mathbb{C}^{a^{(\ell')}}$ erhält. Wenn man jetzt für $\ell > 0$ durch

$$T(\vec{p}^{(\ell)}) : \{\sigma_n^{(\ell)}(\vec{c}^{(\ell)}, \vec{p}^{(\ell)})\}_{n=0}^{\infty} \longrightarrow \{\sigma_n^{(\ell-1)}(\vec{c}^{(\ell-1)}, \vec{p}^{(\ell-1)})\}_{n=0}^{\infty} \quad (3.7)$$

die verschiedenen Stufen der Hierarchie ineinander abbilden kann, so ist die iterierte Folgentransformation

$$T^{(\ell)} = T(\vec{p}^{(0)}) \circ T(\vec{p}^{(1)}) \circ \dots \circ T(\vec{p}^{(\ell)}) \quad (3.8)$$

hierarchisch konsistent und bildet Modellfolgen mit oberem Index ℓ auf konstante Folgen ab, sofern die einfache Folgentransformation für die Modellfolgen $\{\sigma_n^{(0)}(\vec{c}^{(0)}, \vec{p}^{(0)})\} = \{\sigma_n(\vec{c}, \vec{p})\}$ exakt ist. Als Folgerung kann man Modellfolgen angeben für die iterierte Folgentransformation $T^{(\ell)}$. Man sollte sich auch vergegenwärtigen, daß die Zahl der unbestimmten Koeffizienten in den Modellfolgen mit jeder Anwendung der einfachen Folgentransformation geringer wird.

Beispiele für diesen Formalismus werden wir noch zeigen. Zu deren Verständnis sei schon jetzt angemerkt, daß man die Stufe der Iteration mittels $L - \ell$ abzählen muß. Die Stufe der Iteration und die Hierarchieebene verändern sich also gegenläufig. Dies bedeutet, daß man dann eine gute Extrapolation auf den Limes von der iterierten Folgentransformation erwarten kann, wenn sich die transformierten Folgen im Laufe der Iteration immer mehr der sehr einfachen Modellfolge annähern, für die die zugrundeliegende einfache Transformation exakt ist.

Besonders wichtig ist, daß die Parameter \vec{p} der einfachen Folgentransformation auf jeder Stufe der Iteration andere sind. Für vorgebene Hierarchie werden diese Parameter gerade so gewählt, daß die jeweils betrachtete iterierte Folgentransformation hierarchisch konsistent ist. Für gegebene Hierarchie ist das Vieldeutigkeitsproblem damit gelöst. Natürlich muß man nun das Problem der Wahl problemangepaßter Hierarchien angehen. Dieses Problem kann man aber leichter formal behandeln.

Zum Schluß dieses Abschnittes sei bemerkt, daß man die Forderung (3.7) auch dahingehend abändern kann, daß man nur fordert, daß die Abbildung für $n \rightarrow \infty$ asymptotisch gilt. Das bedeutet, daß die Anwendung der zugrundeliegenden Folgentransformation auf

ein Mitglied $\{\sigma_n^{(\ell)}\}$ der Hierarchie der Modellfolgen eine neue Folge $\{\tau_n^{(\ell)}\}$ ergibt, die nicht selbst zur Hierarchie gehört. Man verlangt jedoch, daß die $\{\tau_n^{(\ell)}\}$ asymptotisch für große n gegen eine passende Modellfolge der Hierarchie gehen:

$$T(\vec{p}^{(\ell)}) \left(\{\sigma_n^{(\ell)}(\vec{c}^{(\ell)}, \vec{p}^{(\ell)})\} \right) = \{\tau_n^{(\ell)}\} \sim \{\sigma_n^{(\ell-1)}(\vec{c}^{(\ell-1)}, \vec{p}^{(\ell-1)})\}. \quad (3.9)$$

Iteriert man nun, so steigt man zumindest asymptotisch in der Hierarchie hinunter bis zum Kern der zugrundeliegenden einfachen Transformation. Für eine derartige Vorgehensweise im Rahmen einer *asymptotischen hierarchischen Konsistenz* sind Konvergenzbeweise schwieriger anzutreten. Wir beschränken uns daher im folgenden auf hierarchische Konsistenz im engeren Sinne.

3.3 Die \mathcal{J} -Transformation

3.3.1 Heuristische Herleitung

Wir betrachten die sehr einfache Modellfolge

$$\sigma_n = \sigma + c \omega_n, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.10)$$

Hier ist σ der Limes (bzw. Antilimes), ω_n ist eine Restabschätzung mit $\omega_n \neq 0$ und $\Delta\omega_n \neq 0$, und c ist eine unbekannte Konstante. Diese kann man eliminieren und dann den Grenzwert σ aus den Folgeelementen σ_n berechnen:

$$\sigma = \sigma_n - \omega_n \frac{\Delta\sigma_n}{\Delta\omega_n}, \quad (3.11)$$

mit dem Differenzenoperator aus Gl. (A.13).

Dies kann als Folgentransformation aufgefaßt werden, die die Modellfolge $\{\sigma_n\}$ auf die konstante Folge $\{\sigma\}$ abbildet:

$$T(\{\omega_n\}) : \{\sigma_n\}_{n=0}^{\infty} \longrightarrow \{\sigma, \sigma, \dots\}. \quad (3.12)$$

Die Folge der Restabschätzungen spielt die Rolle der zusätzlichen Parameter \vec{p} , die im vorhergehenden Abschnitt betrachtet wurden.

Bei Anwendung auf Folgen $\{s_n\}$ erhält man als Folgentransformation

$$T(\{\omega_n\}) : \{s_n\}_{n=0}^{\infty} \longrightarrow \left\{ s'_n = s_n - \omega_n \frac{\Delta s_n}{\Delta \omega_n} \right\}_{n=0}^{\infty} \quad (3.13)$$

Bevor wir die Iteration von T besprechen, gehen wir kurz auf die Restabschätzungen ein. Dies wird in späteren Abschnitten dann noch vertieft.

In Gleichung (3.13) kann man verschiedene Restabschätzungen verwenden, zum Beispiel $\omega_n = \Delta s_{n-1}$ oder $\omega_n = (n + \beta)\Delta s_{n-1}$ in Analogie zu den t - und u -Transformationen von Levin [222]. Für die Wahl $\omega_n = \Delta s_n$, die von Smith und Ford [328] vorgeschlagen

wurde, wird Gl. (3.10) identisch zur Δ^2 -Transformation von Aitken [4]. Levin schlug auch die Wahl $\omega_n = -\Delta s_n \Delta s_{n-1} / \Delta^2 s_{n-1}$ vor. Für jede Folgentransformation, die auf Restabschätzungen ω_n basiert, bekommt man entsprechende Varianten. Wir erinnern daran, daß diese als t -Variante im Falle $\omega_n = \Delta s_{n-1}$, als u -Variante im Falle $\omega_n = (n + \beta) \Delta s_{n-1}$, als \tilde{t} -Variante im Falle $\omega_n = \Delta s_n$, und als v -Variante im Falle $\omega_n = -\Delta s_n \Delta s_{n-1} / \Delta^2 s_{n-1}$ bezeichnet werden. In diesen Fällen hängen die Restabschätzungen von den s_n ab, und man erhält nichtlineare Folgentransformationen.

Man kann zum Beispiel auch $\omega_n = (n + \beta)^{-\alpha}$ für positive Konstanten α und β wählen. Hängen die Restabschätzungen wie in diesem Beispiel nicht explizit von den Folgeelementen s_n ab, und man erhält im allgemeinen lineare Folgentransformationen. Dies kann man am Beispiel der Transformation (3.13) explizit ablesen.

Wir bemerken, daß die Transformation (3.13) in den folgenden, mathematisch äquivalenten Weisen geschrieben werden kann, die zu unterschiedlichem numerischem Verhalten entsprechender Computerimplementationen führen können:

$$\begin{aligned}
s'_n &= s_{n+1} - \omega_{n+1} \frac{\Delta s_n}{\Delta \omega_n}, \\
&= \frac{s_{n+1} \Delta \omega_n - \omega_{n+1} \Delta s_n}{\Delta \omega_n}, \\
&= \frac{\omega_{n+1} s_n - s_{n+1} \omega_n}{\Delta \omega_n}, \\
&= \frac{\omega_{n+1} s_n - s_{n+1} \omega_n}{\omega_{n+1} s_n - s_{n+1} \omega_n}, \\
&= \frac{\omega_{n+1} - \omega_n}{[s_{n+1}/\omega_{n+1}] - [s_n/\omega_n]}, \\
&= \frac{[s_{n+1}/\omega_{n+1}] - [s_n/\omega_n]}{[1/\omega_{n+1}] - [1/\omega_n]}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Dies ist ähnlich zu den vielen verschiedenen Darstellungen für Aitken's Δ^2 -Verfahren [368, S. 223, Gln. (5.1-6)-(5.1-12)].

Die Transformation (3.13) ist in der Form identisch zum ϑ -artigen Algorithmus $\vartheta(t_n)$ zur Folgentransformation $t_n = s_n + \omega_n$ (siehe [54, p. 381]).

Wir wenden uns jetzt der Frage zu, wie die einfache Folgentransformation (3.13) iteriert werden kann. Der Begriff der hierarchischen Konsistenz war in Abschnitt 3.2 eingeführt worden. Um dieses Konzept heuristisch anzuwenden, muß man eine Hierarchie von Modellfolgen einführen, die eine Verallgemeinerung der einfachen Modellfolge (3.10) sind. Auf diese wenden wir dann die Transformation (3.13) an und untersuchen, ob die Bedingungen der hierarchischen Konsistenz erfüllt sind.

Zunächst betrachten wir ein einfaches Beispiel. Eine relativ naheliegende Verallgemeinerung von (3.10) ist

$$s_n = s + \omega_n (c_0 + c_1 / (n + \beta)), \quad n \in \mathbb{N}_0, \beta > 0. \tag{3.15}$$

Dies entspricht den ersten beiden Termen einer Poincaré-artigen asymptotischen Entwicklung statt der einfachen Konstante c . Im Sinne einer Ausnutzung von Gleichung (3.7) wenden wir die Transformation (3.13) auf Gl. (3.15) an, um herauszufinden, unter welchen

Bedingungen die einmal transformierte Folge die Form der einfachen Modellfolge (3.10) hat. Das Resultat ist

$$s'_n = s + c_1 \frac{\omega_n \omega_{n+1}}{\Delta \omega_n} \frac{1}{(n + \beta)(n + \beta + 1)}. \quad (3.16)$$

Dies ist tatsächlich von der Form (3.10), wenn man die Restabschätzungen renormiert. Dazu muß man

$$\omega'_n = \frac{\omega_n \omega_{n+1}}{\Delta \omega_n} \frac{1}{(n + \beta)(n + \beta + 1)} \quad (3.17)$$

setzen. Wie im Abschnitt 3.2 schon angekündigt, muß man also die Parameter für eine erneute Anwendung der einfachen Transformation renormieren, was in unserem Falle bedeutet, daß man je nach Stufe der Iteration andere Restabschätzungen verwenden sollte, die man aber aus denen früherer Stufen berechnen kann. Im Sinne einer weiteren Verallgemeinerung kann man auch zulassen, daß in Abhängigkeit von den Iterationsstufen andere Werte für β verwendet werden. Man erhält so den folgenden iterierten Algorithmus:

$$\begin{aligned} s_n^{(0)} &= s_n, & \omega_n^{(0)} &= \omega_n, \\ s_n^{(k+1)} &= s_n^{(k)} - \omega_n^{(k)} \frac{\Delta s_n^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}}, \\ \omega_n^{(k+1)} &= \frac{\omega_n^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}} \frac{1}{(n + \beta_k)_2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Wegen des Pochhammer-Symbols vergleiche man Gl. (A.9). Die Werte β_0, β_1, \dots sind positive Zahlen, beispielsweise von der Form

$$\beta_k = \beta + k\gamma, \quad \beta > 0, \gamma > 0. \quad (3.19)$$

Man kann auch komplizierte Modellfolgen wählen, die zu anderen Hierarchien führen. Eine Möglichkeit ist die Wahl

$$s_n = s + \omega_n (c_0 + c_1 r_n). \quad (3.20)$$

Die Hilfsfolge $\{r_n\}$ wird als Nullfolge angenommen. Anwendung der einfachen Transformation (3.13) ergibt

$$s'_n = s - c_1 \frac{\omega_n \omega_{n+1}}{\Delta \omega_n} \Delta r_n. \quad (3.21)$$

Dies ist von der Form der Modellfolge (3.10) für die Wahl

$$\omega'_n = -\frac{\omega_n \omega_{n+1}}{\Delta \omega_n} \Delta r_n. \quad (3.22)$$

Auf jeder Stufe k der Iteration kann man eine unterschiedliche Hilfsfolge $\{r_n^{(k)}\}$ wählen, die die Rolle der $\{r_n\}$ der letzten Gleichungen spielt. Setzt man noch

$$\delta_n^{(k)} = \Delta r_n^{(k)}, \quad (3.23)$$

erhält man so den iterativen Algorithmus

$$\begin{aligned}
s_n^{(0)} &= s_n, & \omega_n^{(0)} &= \omega_n, \\
s_n^{(k+1)} &= s_n^{(k)} - \omega_n^{(k)} \frac{\Delta s_n^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}}, \\
\omega_n^{(k+1)} &= -\frac{\omega_n^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}} \delta_n^{(k)}, \\
\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= s_n^{(k)}.
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Hier wird, wie auch im folgenden Text, angenommen, daß $\omega_n \neq 0$, $\Delta \omega_n \neq 0$, $\Delta \omega_n^{(k)} \neq 0$ und $\delta_n^{(k)} \neq 0$ für alle nichtnegativen ganzen Zahlen n und k erfüllt ist. Dies wird später noch genauer untersucht. Außerdem werden später die Modellfolgen angegeben, für die die Transformation exakt ist, womit dann auch die Hierarchie für beliebige Iterationsstufen vollständig definiert wird.

Für die Berechnung von $\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\})$ werden die Folgeelemente $\{s_{n+j}\}_{j=0}^k$, $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^k$ und $\{\{\delta_{n+j}^{(l)}\}_{j=0}^{l+1}\}_{l=0}^{k-2}$ benötigt:

$$\left(\{s_{n+j}\}_{j=0}^k, \{\omega_{n+j}\}_{j=0}^k, \{\{\delta_{n+j}^{(l)}\}_{j=0}^{l+1}\}_{l=0}^{k-2}\right) \longrightarrow \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}). \tag{3.25}$$

Um die Notation übersichtlicher zu gestalten, werden diese Details in der Notation für die \mathcal{J} -Transformation im folgenden unterdrückt.

Die iterative Folgentransformation (3.24) wurde zuerst in [162] eingeführt und in [160, 164, 163] genauer untersucht.

Wir bemerken, daß die verschiedenen Ausdrücke in Gl. (3.14) zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation herangezogen werden können, mit unterschiedlichen Auswirkungen auf die numerische Stabilität der Berechnung.

Aufgrund der Verwendung von Restabschätzungen ω_n gehört die \mathcal{J} -Transformation nicht nur zur Klasse der iterativen, sondern auch zu den Levin-artigen Folgentransformationen. Man kann also durch geeignete Wahl von ω_n eine Anzahl von wichtigen Standardvarianten erhalten. Wir definieren die t -Variante als

$$\mathcal{T}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\Delta s_{n-1}\}, \{r_n^{(k)}\}), \tag{3.26}$$

die \tilde{t} -Variante als

$$\tilde{\mathcal{T}}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\Delta s_n\}, \{r_n^{(k)}\}), \tag{3.27}$$

und die u -Variante als

$$\mathcal{U}_n^{(k)}(\alpha, \{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{(n + \alpha)\Delta s_{n-1}\}, \{r_n^{(k)}\}). \tag{3.28}$$

Als ebenfalls sehr wichtig hat sich die Wahl der Hilfsfolgen $\{r_n^{(k)}\}$ herausgestellt. Wir definieren für $\beta > 0$ und $p \geq 1$ die Transformationen

$${}_p \mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{1/(n + \beta + (p - 1)k)\}), \tag{3.29}$$

mit der t -Variante

$${}_p\mathbf{T}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}) = {}_p\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\Delta s_{n-1}\}), \quad (3.30)$$

der \tilde{t} -Variante

$${}_p\tilde{\mathbf{T}}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}) = {}_p\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\Delta s_n\}) \quad (3.31)$$

und der u -Variante

$${}_p\mathbf{U}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}) = {}_p\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{(n + \alpha)\Delta s_{n-1}\}). \quad (3.32)$$

In [162] wurde die Bezeichnung $\mathbb{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ für den Spezialfall

$${}_1\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{1/(n + \beta)\}) \quad (3.33)$$

verwendet.

3.3.2 Alternative Algorithmen zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation

Zusätzlich zum definierenden Rekursionsschema (3.24) existieren weitere Algorithmen zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation. Diese wurden in [160] untersucht. Auf diesen Ergebnissen fußt der vorliegende Abschnitt.

Um den ersten der alternativen Algorithmen herzuleiten, definieren wir

$$D_n^{(k)} = \frac{1}{\omega_n^{(k)}}, \quad N_n^{(k)} = \frac{s_n^{(k)}}{\omega_n^{(k)}}. \quad (3.34)$$

Unter Verwendung der letzten Teilgleichung von Gl. (3.14) kann man schreiben

$$s_n^{(k+1)} = \frac{\Delta(s_n^{(k)}/\omega_n^{(k)})}{\Delta(1/\omega_n^{(k)})} = \frac{\Delta N_n^{(k)}}{\Delta D_n^{(k)}}. \quad (3.35)$$

Die rechte Seite dieser Gleichung kann man also $s_n^{(k+1)} = N_n^{(k+1)}/D_n^{(k+1)}$ gleich setzen. Es folgt, daß $D_n^{(k+1)} = a_n^{(k)}[\Delta D_n^{(k)}]$ und $N_n^{(k+1)} = a_n^{(k)}[\Delta N_n^{(k)}]$ mit denselben Konstanten $a_n^{(k)}$ gelten. Die Bestimmung dieser Konstanten stützt sich auf die Beobachtung, daß

$$[D_n^{(k+1)}]^{-1} = \delta_n^{(k)} [\Delta(1/\omega_n^{(k)})]^{-1} = \delta_n^{(k)} [\Delta D_n^{(k)}]^{-1} \quad (3.36)$$

gilt. Dies folgt aus Gl. (3.24). Auf diese Weise folgt, daß $D_n^{(k)}$ und $N_n^{(k)}$ beide die Dreitermrekursion

$$X_n^{(k+1)} = \frac{\Delta X_n^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} \quad (3.37)$$

erfüllen. Unter Berücksichtigung von Gl. (3.23) ergibt sich der folgende Algorithmus zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation:

$$\begin{aligned} D_n^{(0)} &= 1/\omega_n, & N_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, \\ D_n^{(k+1)} &= \frac{\Delta D_n^{(k)}}{\delta_n^{(k)}}, \\ N_n^{(k+1)} &= \frac{\Delta N_n^{(k)}}{\delta_n^{(k)}}, \\ \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= \frac{N_n^{(k)}}{D_n^{(k)}}. \end{aligned} \tag{3.38}$$

Diese Darstellung zeigt, daß die Verwandtschaft zu Levin-artigen Transformationen [222, 368] nicht nur insofern besteht, daß Restabschätzungen verwendet werden, sondern auch insofern, daß Zähler und Nenner separat mit der gleichen Rekursion berechnet werden können, die sich nur hinsichtlich der Anfangswerte unterscheiden. Hierin zeigt sich auch eine Ähnlichkeit zu dem alternativen Berechnungsverfahren für den E -Algorithmus, das Ford und Sidi [123] eingeführt haben. Dies wird später genauer diskutiert.

Die \mathcal{J} -Transformation kann auch in einem Operatorformalismus dargestellt werden. Hierzu führt man den verallgemeinerten Differenzenoperator

$$\nabla_n^{(k)} = \frac{1}{\delta_n^{(k)}} \Delta \tag{3.39}$$

ein, der auf n -abhängige Folgen wirkt. Damit kann man schreiben

$$\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = \frac{\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)}[s_n/\omega_n]}{\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)}[1/\omega_n]}, \tag{3.40}$$

wie man durch Vergleich mit dem alternativen Algorithmus (3.38) sieht. Es gilt auch

$$N_n^{(k)} = s_n^{(k)}/\omega_n^{(k)} = \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)}[s_n/\omega_n], \tag{3.41a}$$

$$D_n^{(k)} = 1/\omega_n^{(k)} = \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)}[1/\omega_n], \tag{3.41b}$$

Gleichung (3.40) kann man mit dem Operatorformalismus von Weniger [368, Abschn. 7-9] vergleichen. Dort werden Folgentransformationen vom Typ

$$s_n^{(k)} = \frac{P(s_n/\omega_n)}{P(1/\omega_n)} \tag{3.42}$$

betrachtet, mit Operatoren P der Form

$$P(f(n)) = \Delta^k [p_{k-1}(n)f(n)], \tag{3.43}$$

wobei $p_{k-1}(n)$ ein Polynom vom Grade $k-1$ in n bezeichnet. Die Levin-Transformation [222] wird beispielsweise von diesem Schema erfaßt. Der Operatorzugang wurde von Brezinski und Mitarbeitern aufgegriffen [58, 60, 62].

Es gibt einen weiteren Algorithmus für die Berechnung der \mathcal{J} -Transformation. Die Größen

$$\begin{aligned}\widehat{X}_n^{(0)} &= X_n^{(0)}, \\ \widehat{X}_n^{(k)} &= \delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)} X_n^{(k)}, \quad k \in \mathbb{N},\end{aligned}\tag{3.44}$$

erfüllen die Rekursionsbeziehung

$$\begin{aligned}\widehat{X}_n^{(1)} &= \Delta \widehat{X}_n^{(0)}, \\ \widehat{X}_n^{(k+1)} &= \frac{\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}}{\delta_{n+1}^{(0)} \delta_{n+1}^{(1)} \dots \delta_{n+1}^{(k-1)}} \widehat{X}_{n+1}^{(k)} - \widehat{X}_n^{(k)}, \quad k \in \mathbb{N},\end{aligned}\tag{3.45}$$

wenn die $X_n^{(k)}$ die Gleichung (3.37) erfüllen. Die \mathcal{J} -Transformation kann demnach auch über den Algorithmus

$$\begin{aligned}\widehat{D}_n^{(0)} &= 1/\omega_n, & \widehat{N}_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, \\ \widehat{D}_n^{(1)} &= \Delta \widehat{D}_n^{(0)}, & \widehat{N}_n^{(1)} &= \Delta \widehat{N}_n^{(0)}, \\ \widehat{D}_n^{(k+1)} &= \frac{\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}}{\delta_{n+1}^{(0)} \delta_{n+1}^{(1)} \dots \delta_{n+1}^{(k-1)}} \widehat{D}_{n+1}^{(k)} - \widehat{D}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}, \\ \widehat{N}_n^{(k+1)} &= \frac{\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}}{\delta_{n+1}^{(0)} \delta_{n+1}^{(1)} \dots \delta_{n+1}^{(k-1)}} \widehat{N}_{n+1}^{(k)} - \widehat{N}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}, \\ \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= \frac{\widehat{N}_n^{(k)}}{\widehat{D}_n^{(k)}}\end{aligned}\tag{3.46}$$

erfolgen. Dies zeigt auch, daß die \mathcal{J} -Transformation ebenfalls über die Quotienten

$$f_n^{(k)} = \delta_{n+1}^{(k)} / \delta_n^{(k)}, \quad k \in \mathbb{N}_0,\tag{3.47}$$

oder über deren inverse Produkte

$$\begin{aligned}\Phi_n^{(0)} &= 1, \\ \Phi_n^{(k)} &= [f_n^{(0)} f_n^{(1)} \dots f_n^{(k-1)}]^{-1}, \quad k \in \mathbb{N}\end{aligned}\tag{3.48}$$

definiert werden kann. Man kann die Transformation also auch über die Rekursionsbeziehungen

$$\begin{aligned}\widehat{D}_n^{(0)} &= 1/\omega_n, & \widehat{N}_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, \\ \widehat{D}_n^{(1)} &= \Delta \widehat{D}_n^{(0)}, & \widehat{N}_n^{(1)} &= \Delta \widehat{N}_n^{(0)}, \\ \widehat{D}_n^{(k+1)} &= \frac{1}{f_n^{(0)} f_n^{(1)} \dots f_n^{(k-1)}} \widehat{D}_{n+1}^{(k)} - \widehat{D}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}_0, \\ \widehat{N}_n^{(k+1)} &= \frac{1}{f_n^{(0)} f_n^{(1)} \dots f_n^{(k-1)}} \widehat{N}_{n+1}^{(k)} - \widehat{N}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}_0, \\ \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= \frac{\widehat{N}_n^{(k)}}{\widehat{D}_n^{(k)}}\end{aligned}\tag{3.49}$$

und

$$\begin{aligned}\widehat{D}_n^{(0)} &= 1/\omega_n, & \widehat{N}_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, \\ \widehat{D}_n^{(k+1)} &= \Phi_n^{(k)}\widehat{D}_{n+1}^{(k)} - \widehat{D}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}_0, \\ \widehat{N}_n^{(k+1)} &= \Phi_n^{(k)}\widehat{N}_{n+1}^{(k)} - \widehat{N}_n^{(k)}, & k \in \mathbb{N}_0, \\ \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= \frac{\widehat{N}_n^{(k)}}{\widehat{D}_n^{(k)}}\end{aligned}\tag{3.50}$$

definieren.

Die alternativen Algorithmen (3.49) und (3.50) erlauben die Diskussion von Transformationen, die sich als Grenzfall für $n \rightarrow \infty$ ergeben. Diese Grenztransformationen sind wichtig in der formalen Theorie der Regularität und der Beschleunigungseffekte von Transformationen linearconvergenter Folgen von Germain-Bonne [131], die in [368] weiter ausgebaut wurde. Die Anwendung dieser Theorie auf die \mathcal{J} -Transformation und die Grenztransformationen werden später diskutiert.

Es sei bemerkt, daß die verschiedenen Rekursionsschemata unter Verwendung von gleichen Rekursionen für Zähler und Nenner sowie die definierende Darstellung (3.24) jeweils Rekursionen vom Dreieckstyp sind. Rekursionsbeziehungen von diesem Typ haben die Struktur

$$\begin{aligned}T_\nu^0 &= T_\nu, \\ T_\nu^k &= \lambda_\nu^k T_\nu^{k-1} + \mu_\nu^k T_{\nu+1}^{k-1}, & k \in \mathbb{N}\end{aligned}\tag{3.51}$$

für ganzzahliges ν und wurden von Brezinski und Walz [65] untersucht. Die Konsequenzen dieser Beobachtung werden ebenfalls später betrachtet.

Eine wichtige Folgerung aus den Ergebnissen dieses Abschnittes ist, daß der numerische Aufwand zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation für gegebene $\delta_n^{(k)}$ im wesentlichen derselbe ist wie für die Berechnung der Levin-Transformation [368, Abschn. 7.5]. Folglich kann man die \mathcal{J} -Transformation sehr günstig berechnen. Weitere numerische Fragestellungen werden in folgenden Abschnitten diskutiert.

3.3.3 Allgemeine Eigenschaften der \mathcal{J} -Transformation

Man sieht leicht ein, daß die \mathcal{J} -Transformation invariant unter Translation und homogen in s_n ist. Sie ist demnach quasilinear [55],[59, Abschn. 1.4]. Die folgenden Sätze gelten [160]:

Satz 3.1

Die \mathcal{J} -Transformation ist quasilinear, das heißt, es gilt

$$\mathcal{J}_n^{(k)}(\{As_n + B\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = A \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) + B\tag{3.52}$$

für beliebige Konstanten A und B .

Satz 3.2

Die \mathcal{J} -Transformation ist multiplikativ invariant in ω_n , das heißt, es gilt

$$\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{C\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\})\tag{3.53}$$

für jede Konstante $C \neq 0$.

Beweis: Diese Sätze folgen direkt aus der Definition (3.24), da die zugrundeliegende Folgentransformation (3.13) diese Eigenschaften hat. \square

Ein einfaches Korollar ist

Satz 3.3

Die \mathcal{T} -, $\tilde{\mathcal{T}}$ - und \mathcal{U} -Transformationen sind quasi-linear, das heißt, es gilt

$$\begin{aligned}\mathcal{T}_n^{(k)}(\{As_n + B\}, \{r_n^{(k)}\}) &= A \mathcal{T}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) + B, \\ \tilde{\mathcal{T}}_n^{(k)}(\{As_n + B\}, \{r_n^{(k)}\}) &= A \tilde{\mathcal{T}}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) + B, \\ \mathcal{U}_n^{(k)}(\beta, \{As_n + B\}, \{r_n^{(k)}\}) &= A \mathcal{U}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{r_n^{(k)}\}) + B\end{aligned}\tag{3.54}$$

für alle Konstanten $A \neq 0$ und B .

Schließlich bemerken wir, daß n -unabhängige Faktoren der Hilfsfolge $\{r_n^{(k)}\}$ keinen Einfluß haben:

Satz 3.4

Die \mathcal{J} -Transformation ist multiplikativ invariant in $r_n^{(k)}$, das heißt, es gilt

$$\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{\alpha_k \cdot r_n^{(k)}\}) = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}),\tag{3.55}$$

für alle Konstanten $\alpha_k \neq 0$.

Beweis: Dies folgt unmittelbar aus der Tatsache, daß die \mathcal{J} -Transformation über den Algorithmus (3.49) berechnet werden kann, der nur von den Größen $f_n^{(k)}$ aus Gl. (3.47) abhängt. Denn diese Quotienten sind invariant unter der Skalierung $r_n^{(k)} \rightarrow \alpha_k r_n^{(k)}$. \square

Für die folgenden Betrachtungen nehmen wir an, daß die Hilfsfolgen $\{r_n^{(k)}\}$ fest vorgegeben sind. Uns interessieren Bedingungen an die Wahl der Restabschätzungen $\{\omega_n\}$, die garantieren, daß die \mathcal{J} -Transformation wohldefiniert ist.

Unter diesen Voraussetzungen hängt die Transformation $\mathcal{J}_n^{(k)}$ nur von den $(2k + 2)$ Zahlen $\{s_{n+j}\}_{j=0}^k$ und $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^k$ ab. Man kann also schreiben

$$\mathcal{J}_n^{(k)} = \Gamma_n^{(k)}(s_n, s_{n+1}, \dots, s_{n+k} \mid \omega_n, \omega_{n+1}, \dots, \omega_{n+k})\tag{3.56}$$

und die Transformation als Abbildung

$$\begin{aligned}\Gamma_n^{(k)}: \quad \mathbb{C}^{k+1} \times Y_n^{(k)} &\longrightarrow \mathbb{C}, \\ ((x_1, \dots, x_{k+1}), (y_1, \dots, y_{k+1})) &\longrightarrow \Gamma_n^{(k)}(x_1, \dots, x_{k+1} \mid y_1, \dots, y_{k+1})\end{aligned}\tag{3.57}$$

auffassen. Hier ist $Y_n^{(k)}$ eine geeignete Untermenge von \mathbb{C}^{k+1} : Da die \mathcal{J} -Transformation von den Inversen der Restabschätzungen ω_n abhängt, ist eine notwendige Bedingung, daß keine Komponente irgendeines Vektors in $Y_n^{(k)}$ verschwindet. Unter dieser Voraussetzung folgt aus der Darstellung (3.40), daß $\mathcal{J}_n^{(k)}$ eine stetige Funktion von $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^k$ ist, wenn

$$\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [1/\omega_n] \neq 0\tag{3.58}$$

gilt, das heißt, wenn der Nenner in Gl. (3.40) nicht verschwindet. Das ist äquivalent zu der Aussage, daß $\Gamma_n^{(k)}$ eine stetige Funktion von (y_1, \dots, y_{k+1}) ist, wenn

$$\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [1/\omega_n] \Big|_{(\omega_n, \dots, \omega_{n+k})=(y_1, \dots, y_{k+1})} \neq 0 \quad (3.59)$$

erfüllt ist. Wir definieren also

$$Y_n^{(k)} = \left\{ \vec{y} \in \mathbb{C}^{k+1} \mid \prod_{j=1}^{k+1} y_j \neq 0 \text{ und (3.59) gilt.} \right\} \quad (3.60)$$

Dann ist $\Gamma_n^{(k)}$ definiert und stetig auf $\mathbb{C}^{k+1} \times Y_n^{(k)}$. Anstelle von Gl. (3.59) kann man auch die äquivalenten Bedingungen

$$\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [1/\omega_n] \Big|_{(\omega_n, \dots, \omega_{n+k})=(y_1, \dots, y_{k+1})} \neq 0 \quad (3.61)$$

oder

$$\widehat{D}_n^{(k)} \Big|_{(\omega_n, \dots, \omega_{n+k})=(y_1, \dots, y_{k+1})} \neq 0 \quad (3.62)$$

verwenden. Wir bemerken, daß $\widehat{D}_n^{(k)} = \delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)} D_n^{(k)}$ die Nenner in Algorithmus (3.46) sind. Demnach sind die erlaubten Werte von $\{\omega_n\}$ so einzuschränken, daß diese Nenner nicht verschwinden.

Wir erinnern daran, daß die \mathcal{J} -Transformation über die Rekursionsbeziehung (3.49) berechnet werden kann, die von den Größen $\Phi_n^{(k)}$ abhängt, die in Gl. (3.48) definiert sind. Wenn wir annehmen, daß für alle $k \in \mathbb{N}$ die Grenzwerte

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \Phi_n^{(k)} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}}{\delta_{n+1}^{(0)} \delta_{n+1}^{(1)} \dots \delta_{n+1}^{(k-1)}} = \Phi_k \quad (3.63)$$

existieren (es gilt stets $\Phi_0 = 1$), dann kann man eine Transformation $\overset{\circ}{\mathcal{J}}$ als Grenzwert für große n durch das Rekursionsschema

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{D}_n^{(0)} &= 1/\omega_n, & \overset{\circ}{N}_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, \\ \overset{\circ}{D}_n^{(k+1)} &= \Phi_k \overset{\circ}{D}_{n+1}^{(k)} - \overset{\circ}{D}_n^{(k)}, & k &\in \mathbb{N}_0, \\ \overset{\circ}{N}_n^{(k+1)} &= \Phi_k \overset{\circ}{N}_{n+1}^{(k)} - \overset{\circ}{N}_n^{(k)}, & k &\in \mathbb{N}_0, \\ \overset{\circ}{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= \frac{\overset{\circ}{N}_n^{(k)}}{\overset{\circ}{D}_n^{(k)}} \end{aligned} \quad (3.64)$$

definieren. Diese wird im folgenden als *Grenztransformation* bezeichnet. Da die Koeffizienten der Rekursionsbeziehungen nicht mehr von n abhängen, sieht man, daß $\overset{\circ}{\mathcal{N}}_n^{(k)}$, $\overset{\circ}{D}_n^{(k)}$

und $\overset{\circ}{\mathcal{J}}_n^{(k)}$ von n nur implizit via s_n und ω_n abhängen, aber nicht explizit. Demnach kann man $\overset{\circ}{\mathcal{J}}_n^{(k)}$ als eine Funktion der $(2k+2)$ Zahlen $\{s_{n+j}\}_{j=0}^k$ und $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^k$ auffassen,

$$\overset{\circ}{\mathcal{J}}_n^{(k)} = \overset{\circ}{\Gamma}_k \left(s_n, s_{n+1}, \dots, s_{n+k} \mid \omega_n, \omega_{n+1}, \dots, \omega_{n+k} \right), \quad (3.65)$$

oder auch als eine Funktion

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\Gamma}_k: \quad \mathbb{C}^{k+1} \times \overset{\circ}{Y}_k &\longrightarrow \mathbb{C}, \\ ((x_1, \dots, x_{k+1}), (y_1, \dots, y_{k+1})) &\longrightarrow \overset{\circ}{\Gamma}_k(x_1, \dots, x_{k+1} \mid y_1, \dots, y_{k+1}). \end{aligned} \quad (3.66)$$

Hier ist $\overset{\circ}{Y}_k$ eine geeignete Teilmenge von \mathbb{C}^{k+1} : Man muß

$$\overset{\circ}{D}_n^{(k)} \Big|_{(\omega_n, \dots, \omega_{n+k}) = (y_1, \dots, y_{k+1})} \neq 0 \quad (3.67)$$

verlangen. Dann ist $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ definiert und stetig auf $\mathbb{C}^{k+1} \times \overset{\circ}{Y}_k$ mit

$$\overset{\circ}{Y}_k = \left\{ \vec{y} \in \mathbb{C}^{k+1} \mid \prod_{j=1}^{k+1} y_j \neq 0 \text{ und (3.67) gilt.} \right\} \quad (3.68)$$

Zähler und Nenner der Grenztransformation (3.64) erfüllen die gleichen Rekursionsbeziehungen, die man auch als verallgemeinerte Differenzgleichung auffassen kann. Zusätzlich sind sie lineare Funktionen der Anfangswerte für $k=0$. Folglich kann man sie durch die gleiche Linearform

$$L_k(\vec{v}) = \sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} v_j, \quad \vec{v} = (v_1, \dots, v_{k+1}) \in \mathbb{C}^{k+1} \quad (3.69)$$

darstellen. Diese Linearform wird angewandt auf den Vektor $(1/\omega_n, \dots, 1/\omega_{n+k})$ im Falle der Nenner und auf den Vektor $(s_n/\omega_n, \dots, s_{n+k}/\omega_{n+k})$ im Falle der Zähler. Es gilt

$$\overset{\circ}{\Gamma}_k = \frac{L_k((x_1/y_1, \dots, x_{k+1}/y_{k+1}))}{L_k((1/y_1, \dots, 1/y_{k+1}))}. \quad (3.70)$$

Für $\prod_{j=1}^{k+1} v_j \neq 0$ kann man schreiben

$$L_k((v_1, \dots, v_{k+1})) = \overset{\circ}{D}_0^{(k)} \Big|_{(\omega_0, \dots, \omega_k) = (1/v_1, \dots, 1/v_{k+1})}. \quad (3.71)$$

Gleichung (3.64) impliziert, daß die Koeffizienten $l_j^{(k)}$ nur von den Limiten $\Phi_0, \dots, \Phi_{k-1}$ aus Gl. (3.63) abhängen. Mit der Darstellung (3.70) ergibt sich sofort, daß die Grenztransformation $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ für konstante Vektoren exakt ist,

$$\overset{\circ}{\Gamma}_k(c, c, \dots, c \mid y_1, \dots, y_{k+1}) = c, \quad (3.72)$$

und daß $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ eine lineare Funktion und damit eine homogene Funktion ersten Grades der ersten $(k+1)$ Argumente ist. Ferner folgt, daß $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ multiplikativ invariant in den letzten $(k+1)$ Variablen ist und demnach eine homogene Funktion nullten Grades in diesen Variablen.

Verfährt man völlig analog für $\Gamma_n^{(k)}$, wobei man von dem Rekursionsschema (3.50) ausgeht, so erhält man die Darstellung

$$\Gamma_n^{(k)} = \frac{L_n^{(k)}\left(\left(x_1/y_1, \dots, x_{k+1}/y_{k+1}\right)\right)}{L_n^{(k)}\left(\left(1/y_1, \dots, 1/y_{k+1}\right)\right)} \quad (3.73)$$

von $\Gamma_n^{(k)}$ über die Linearform

$$L_n^{(k)}(\vec{v}) = \sum_{j=1}^{k+1} l_{n,j}^{(k)} v_j, \quad \vec{v} \in \mathbb{C}^{k+1}, \quad (3.74)$$

deren Koeffizienten $l_{n,j}^{(k)}$ jetzt von n abhängen und stetige Funktionen der Größen $\Phi_n^{(k)}$ aus Gl. (3.48) sind. Folglich ist $\Gamma_n^{(k)}$ linear in den ersten $(k+1)$ Variablen. Ferner ist die Transformation exakt für konstante Folgen, das heißt, es gilt

$$\Gamma_n^{(k)}(c, c, \dots, c \mid y_1, \dots, y_{k+1}) = c. \quad (3.75)$$

Die Koeffizienten der verschiedenen Linearformen sind über

$$\lim_{n \rightarrow \infty} l_{n,j}^{(k)} = l_j^{(k)} \quad (3.76)$$

verknüpft, falls die Grenzwerte (3.63) für alle $k \in \mathbb{N}$ existieren. Ferner kann man die Bedingungen (3.62) und (3.67) als

$$L_n^{(k)}\left(\left(1/y_1, \dots, 1/y_{k+1}\right)\right) \neq 0 \quad (3.77)$$

im Falle von $\Gamma_n^{(k)}$ und $Y_n^{(k)}$ beziehungsweise als

$$L_k\left(\left(1/y_1, \dots, 1/y_{k+1}\right)\right) \neq 0 \quad (3.78)$$

im Falle von $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ und $\overset{\circ}{Y}_k$ formulieren. Unter Verwendung von Gl. (3.76) ergibt sich außerdem, daß die Bedingungen $\vec{y} \in \overset{\circ}{Y}_k$ und $\vec{y} = \lim_{n \rightarrow \infty} \vec{y}_n$ die Relation $\vec{y}_n \in \overset{\circ}{Y}_k$ für genügend große n implizieren. Wir bemerken, daß $\overset{\circ}{Y}_k$ und $Y_n^{(k)}$ offene Mengen sind.

Insgesamt haben wir damit den folgenden Satz bewiesen:

Satz 3.5

(J-0) $\mathcal{J}_n^{(k)}$ aus Gl. (3.24) kann als stetige Abbildung $\Gamma_n^{(k)}$ auf $\mathbb{C}^{k+1} \times Y_n^{(k)}$ angesehen werden, wobei $Y_n^{(k)}$ in (3.60) definiert ist.

(J-1) Aufgrund der Sätze 3.1 und 3.2 ist $\Gamma_n^{(k)}$ eine homogene Funktion vom ersten Grade in den ersten $(k+1)$ Variablen und eine homogene Funktion vom nullten Grade in den letzten $(k+1)$ Variablen. Für alle Vektoren $\vec{x} \in \mathbb{C}^{k+1}$ und $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ und für alle komplexen Konstanten λ und $\mu \neq 0$ gilt demnach

$$\begin{aligned}\Gamma_n^{(k)}(\lambda\vec{x} | \vec{y}) &= \lambda\Gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}), \\ \Gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \mu\vec{y}) &= \Gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}).\end{aligned}\tag{3.79}$$

(J-2) $\Gamma_n^{(k)}$ ist linear in den ersten $(k+1)$ Variablen. Für alle Vektoren $\vec{x} \in \mathbb{C}^{k+1}$, $\vec{x}' \in \mathbb{C}^{k+1}$, und $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ gilt also

$$\Gamma_n^{(k)}(\vec{x} + \vec{x}' | \vec{y}) = \Gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}) + \Gamma_n^{(k)}(\vec{x}' | \vec{y}).\tag{3.80}$$

(J-3) Für alle konstanten Vektoren $\vec{c} = (c, c, \dots, c) \in \mathbb{C}^{k+1}$ und alle Vektoren $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ gilt

$$\Gamma_n^{(k)}(\vec{c} | \vec{y}) = c.\tag{3.81}$$

(J-4) Wenn die Grenzwerte (3.63) für alle $k \in \mathbb{N}$ existieren, dann gibt es eine Grenztransformation $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ gemäß

$$\overset{\circ}{\Gamma}_k(\vec{x} | \vec{y}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \Gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}), \quad \vec{x} \in \mathbb{C}^{k+1}, \vec{y} \in \overset{\circ}{Y}_k\tag{3.82}$$

die stetig auf $\mathbb{C}^{k+1} \times \overset{\circ}{Y}_k$ ist, wobei $\overset{\circ}{Y}_k$ in Gl. (3.68) definiert ist. Außerdem ist die Grenztransformation $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ ebenfalls homogen und linear gemäß (J-1) und (J-2). Ferner ist sie exakt auf konstanten Vektoren gemäß Gl. (3.73).

Im folgenden soll die Linearform L_k genauer charakterisiert werden. Für jede Konstante $\rho \neq 0$ kann man

$$\overset{\circ}{D}_n^{(0)} = \rho^{-n}\tag{3.83}$$

setzen. Dann ergibt die direkte Anwendung des Algorithmus (3.64)

$$\overset{\circ}{D}_n^{(l)} = \rho^{-n-l} \prod_{j=0}^{l-1} (\Phi_j - \rho),\tag{3.84}$$

was man durch vollständige Induktion nach l zeigt. Gleichung (3.71) impliziert

$$L_k\left((1, 1/\rho, \dots, \rho^{-k})\right) = \rho^{-k} \prod_{j=0}^{k-1} (\Phi_j - \rho).\tag{3.85}$$

Durch Koeffizientenvergleich von

$$\prod_{j=0}^{k-1} (\Phi_j - \rho) = \sum_{j=0}^k p_j^{(k)} \rho^j \quad (3.86)$$

und

$$\rho^k L_k((1, 1/\rho, \dots, \rho^{-k})) = \sum_{j=0}^k l_{k-j+1}^{(k)} \rho^j . \quad (3.87)$$

kann man jetzt die Koeffizienten $l_j^{(k)}$ der Linearform L_k bestimmen. Damit ergibt sich das folgende Lemma:

Lemma 3.6

(i) Das Polynom $\rho^k L_k((1, 1/\rho, \dots, \rho^{-k}))$ in ρ hat die Nullstellen $\Phi_0 = 1, \Phi_1, \dots, \Phi_k$.

(ii) Sei $\rho \neq 0$. Dann ist die Bedingung $(1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$ äquivalent zu $\rho \notin \{\Phi_0, \Phi_1, \dots, \Phi_k\}$.

(iii) Wenn die Koeffizienten $p_j^{(k)}$ durch Gl. (3.86) und die Koeffizienten $l_j^{(k)}$ durch Gl. (3.69) definiert sind, dann gilt

$$l_j^{(k)} = p_{k-j+1}^{(k)} \quad (3.88)$$

für $k \geq 0$ und $1 \leq j \leq k + 1$.

Im folgenden Lemma wird eine Eigenschaft der Grenztransformation $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ bewiesen, die später für den Fall linearer Konvergenz benötigt wird.

Lemma 3.7

Die Grenztransformation $\overset{\circ}{\Gamma}_k$ erfüllt für $q \neq 1$ und $(1, q, \dots, q^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$ die Gleichung

$$\overset{\circ}{\Gamma}_k \left(0, a, \dots, a \sum_{j=0}^{k-1} q^j \mid 1, q, \dots, q^k \right) = \frac{a}{1-q} . \quad (3.89)$$

Beweis: Gleichungen (3.69) und (3.70) implizieren

$$\begin{aligned}
\overset{\circ}{\Gamma}_k \left(0, a, \dots, a \sum_{j=0}^{k-1} q^j \mid 1, q, \dots, q^k \right) &= a \frac{\sum_{j=2}^{k+1} l_j^{(k)} q^{1-j} \sum_{\mu=0}^{j-2} q^\mu}{\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} q^{1-j}} \\
&= \frac{a}{1-q} \frac{\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} q^{1-j} (1 - q^{j-1})}{\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} q^{1-j}} \\
&= \frac{a}{1-q} \left\{ 1 - \frac{\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)}}{\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} q^{1-j}} \right\}.
\end{aligned} \tag{3.90}$$

Da

$$\sum_{j=1}^{k+1} l_j^{(k)} = L_k((1, 1, \dots, 1)) = 0 \tag{3.91}$$

gilt als Folge von Lemma 3.6, folgt Gl. (3.88). \square

Mit Levin-artigen Transformationen teilt die \mathcal{J} -Transformation die folgende Eigenschaft [328, Lemma 1, S. 227]:

Lemma 3.8

Wenn für eine gegebene Folge s_n mit Grenzwert s die Restabschätzungen ω_n bis auf eine Konstante $c \neq 0$ exakt sind, was gleichbedeutend mit $\omega_n = c(s_n - s)$ ist, dann gilt $\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = s$ für alle n und $k > 0$.

Beweis: Satz 3.1 ergibt

$$\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = s + \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n - s\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}). \tag{3.92}$$

Der zweite Term auf der rechten Seite verschwindet als Folge von Gl. (3.40) und $s_n - s = \omega_n/c$. \square

Als einfache Folgerung kann man zeigen, daß die verschiedenen Varianten der \mathcal{J} -Transformation für die geometrische Reihe exakt sind. Bekanntermaßen ist diese Tatsache bedeutsam in der formalen Theorie von Germain-Bonne [131, 368].

Satz 3.9

Die \mathcal{J} -Transformation ist exakt für die geometrische Reihe, wenn man die Folge $\{\omega_n\}$ so wählt, daß $s_n = s + c\omega_n$ mit $c \neq 0$ gilt. Dies ist erfüllt für $\omega_n = \Delta s_{n-1}$, für $\omega_n = \Delta s_n$ oder für $\omega_n = -\Delta s_n \Delta s_{n-1} / \Delta^2 s_{n-1}$. Dies impliziert, daß die t -, \tilde{t} - und v -Varianten der \mathcal{J} -Transformation für die geometrische Reihe exakt sind.

Beweis: Wenn $s_n = s + c\omega_n$ gilt, folgt die Aussage aufgrund von Lemma 3.8. Diese Gleichung gilt jedoch für die t -, \tilde{t} - und v -Varianten. Dies folgt aus den Beziehungen

$$\Delta s_n = q^{n+1}, \quad \Delta^2 s_n = q^{n+1}/(q-1), \quad (3.93)$$

für die Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n q^j = \frac{1-q^{n+1}}{1-q} = s - q^{n+1}s = s - s\Delta s_n = s - sq\Delta s_{n-1} = s - \frac{\Delta s_n \Delta s_{n-1}}{\Delta^2 s_{n-1}} \quad (3.94)$$

der geometrischen Reihe

$$s = \sum_{j=0}^{\infty} q^j = \frac{1}{1-q}, \quad |q| < 1. \quad (3.95)$$

In allen betrachteten Fällen ist $(s_n - s)/\omega_n$ demnach gleich einer Konstanten c . \square

Wir bemerken, daß dieser Satz in Anbetracht von Satz 3.11, Gl. (3.102) für beliebige $r_n^{(k)}$ gilt.

Ab jetzt wird die Notation

$$\sum_{n > n_l > n_{l+1} > \dots > n_{l+k-1}} = \sum_{n_l=0}^{n-1} \sum_{n_{l+1}=0}^{n_l-1} \dots \sum_{n_{l+k-1}=0}^{n_{l+k-2}-1} \quad (3.96)$$

für positive k und l benutzt. Leere Summen werden als Null angenommen.

Lemma 3.10

Man nehme an, daß für alle $n \in \mathbb{N}_0$ der Quotient $(s_n - s)/\omega_n$ als eine Reihe der Form

$$\frac{s_n - s}{\omega_n} = c_0 + \sum_{j=1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_1 > n_2 > \dots > n_j} \delta_{n_1}^{(0)} \delta_{n_2}^{(1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)} \quad (3.97)$$

mit $c_0 \neq 0$ ausgedrückt werden kann. Dann gilt

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{\omega_n^{(k)}} = c_k + \sum_{j=k+1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_{k+1} > n_{k+2} > \dots > n_j} \delta_{n_{k+1}}^{(k)} \delta_{n_{k+2}}^{(k+1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)}. \quad (3.98)$$

Beweis: Dies ergibt sich bei Anwendung des Operators $\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)}$ auf $(s_n - s)/\omega_n$. Dabei verschwinden alle Terme mit Koeffizienten c_0, \dots, c_{k-1} gemäß

$$\begin{aligned}
& \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} \left(c_0 + c_1 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} + c_2 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} \sum_{n_2=0}^{n_1-1} \delta_{n_2}^{(1)} \right. \\
& \quad \left. + \dots + c_{k-1} \sum_{n > n_1 > n_2 > \dots > n_{k-1}} \delta_{n_1}^{(0)} \delta_{n_2}^{(1)} \dots \delta_{n_{k-1}}^{(k-2)} \right) = \\
& \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(1)} \left(c_1 + c_2 \sum_{n_2=0}^{n-1} \delta_{n_2}^{(1)} \right. \\
& \quad \left. + \dots + c_{k-1} \sum_{n > n_2 > \dots > n_{k-1}} \delta_{n_2}^{(1)} \dots \delta_{n_{k-1}}^{(k-2)} \right) = \\
& \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(2)} \left(c_2 + c_3 \sum_{n_3=0}^{n-1} \delta_{n_3}^{(2)} \right. \\
& \quad \left. + \dots + c_{k-1} \sum_{n > n_3 > \dots > n_{k-1}} \delta_{n_3}^{(2)} \dots \delta_{n_{k-1}}^{(k-2)} \right) = \\
& \quad \vdots \\
& \nabla_n^{(k-1)} \left(c_{k-1} \right) = 0 .
\end{aligned} \tag{3.99}$$

Man erhält

$$\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [(s_n - s)/\omega_n] = c_k + \sum_{j=k+1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_{k+1} > n_{k+2} > \dots > n_j} \delta_{n_{k+1}}^{(k)} \delta_{n_{k+2}}^{(k+1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)} . \tag{3.100}$$

Es gilt jedoch

$$\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [(s_n - s)/\omega_n] = (s_n^{(k)} - s) \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [(1/\omega_n)] = (s_n^{(k)} - s)/\omega_n^{(k)} . \tag{3.101}$$

□

3.3.4 Der Kern der \mathcal{J} -Transformation

In diesem Abschnitt studieren wir den Kern der \mathcal{J} -Transformation. Das Ziel ist demnach, alle Folgen $\{s_n\}$ zu finden, für die die Transformation den (Anti-)Limes s exakt mit endlich vielen Operationen liefert.

Satz 3.11

Der Kern der Transformation $\mathcal{J}^{(k)} : \{s_n\} \rightarrow \{\mathcal{J}_n^{(k)}\}$ ist gegeben durch die Folgen der Form

$$s_n = s + \omega_n \left(c_0 + c_1 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} + c_2 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} \sum_{n_2=0}^{n_1-1} \delta_{n_2}^{(1)} \right. \\ \left. + \cdots + c_{k-1} \sum_{n > n_1 > n_2 > \cdots > n_{k-1}} \delta_{n_1}^{(0)} \delta_{n_2}^{(1)} \cdots \delta_{n_{k-1}}^{(k-2)} \right) \quad (3.102)$$

mit Konstanten c_0, \dots, c_{k-1} .

Beweis: Für eine Folge der Form (3.102) folgt aus Gl. (3.101)

$$(s_n^{(k)} - s) / \omega_n^{(k)} = \left\{ \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \cdots \nabla_n^{(0)} \left(c_0 + c_1 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} + c_2 \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} \sum_{n_2=0}^{n_1-1} \delta_{n_2}^{(1)} \right. \right. \\ \left. \left. + \cdots + c_{k-1} \sum_{n > n_1 > n_2 > \cdots > n_{k-1}} \delta_{n_1}^{(0)} \delta_{n_2}^{(1)} \cdots \delta_{n_{k-1}}^{(k-1)} \right) \right\}. \quad (3.103)$$

Die Darstellung (3.99) impliziert in Verbindung mit (3.40), daß der Ausdruck in den geschweiften Klammern verschwindet und demnach die Transformation für die Folge (3.102) exakt ist:

$$s_n^{(k)} = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = s. \quad (3.104)$$

Wenn umgekehrt Gl. (3.104) gilt, dann folgt aus Gl. (3.40)

$$\Delta \nabla_n^{(k-2)} \cdots \nabla_n^{(0)} [s_n / \omega_n] = s \Delta \nabla_n^{(k-2)} \cdots \nabla_n^{(0)} [1 / \omega_n]. \quad (3.105)$$

Dies ist gleichbedeutend mit

$$\nabla_n^{(k-2)} \cdots \nabla_n^{(0)} [s_n / \omega_n] = s \nabla_n^{(k-2)} \cdots \nabla_n^{(0)} [1 / \omega_n] + c_{k-1} \quad (3.106)$$

mit irgendeiner Konstante c_{k-1} . Verwendung der Definition von $\nabla_n^{(k-2)}$ führt auf

$$\Delta \nabla_n^{(k-3)} \cdots \nabla_n^{(0)} [s_n / \omega_n] = s \Delta \nabla_n^{(k-3)} \cdots \nabla_n^{(0)} [1 / \omega_n] + c_{k-1} \delta_n^{(k-2)}. \quad (3.107)$$

Summation über n resultiert in

$$\nabla_n^{(k-3)} \cdots \nabla_n^{(0)} [s_n / \omega_n] = s \nabla_n^{(k-3)} \cdots \nabla_n^{(0)} [1 / \omega_n] + c_{k-1} \sum_{n_{k-1}=0}^{n-1} \delta_{n_{k-1}}^{(k-2)} + c_{k-2}. \quad (3.108)$$

Ähnlich können alle Operatoren $\nabla_n^{(j)}$ nacheinander für immer kleinere j eliminiert werden. Dies führt schließlich auf Gl. (3.102). \square

Man betrachte Modellfolgen der Form

$$s_n^{(k)} = s + \omega_n^{(k)} \sum_{j=0}^{K-k-1} c_j^{(k)} \phi_{j,n}^{(k)}, \quad (3.109)$$

mit $\omega_n^{(k)} \neq 0$ und Hilfsfolgen $\phi_{j,n}^{(k)}$ mit $\phi_{0,n}^{(k)} = 1$. Für $k = 0$ hängen die Modellfolgen von K unabhängigen Koeffizienten $c_j^{(0)}$ ab. Diese Modellfolgen werden jetzt in Beziehung zu früheren Darstellungen für den Kern gebracht.

Gleichung (3.34) hat zur Folge, daß die Folgen (3.109) auch als

$$N_n^{(k)} = s D_n^{(k)} + \sum_{j=0}^{K-k-1} c_j^{(k)} \phi_{j,n}^{(k)} \quad (3.110)$$

geschrieben werden können. Ein Iterationsschritt des Verfahren (3.38) ergibt

$$\begin{aligned} N_n^{(k+1)} &= s D_n^{(k+1)} + \sum_{j=1}^{K-k-1} c_j^{(k)} \frac{\Delta \phi_{j,n}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} \\ &= s D_n^{(k+1)} + \sum_{j=0}^{K-k-2} c_{j+1}^{(k)} \frac{\Delta \phi_{j+1,n}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}}. \end{aligned} \quad (3.111)$$

Dies hat wieder die Form (3.110), wenn man

$$c_j^{(k+1)} = c_{j+1}^{(k)} \quad (3.112)$$

und

$$\phi_{j,n}^{(k+1)} = \frac{\Delta \phi_{j+1,n}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} = \nabla_n^{(k)} \phi_{j+1,n}^{(k)} \quad (3.113)$$

setzt. Hierbei muß man noch

$$\phi_{0,n}^{(k+1)} = 1 = \frac{\Delta \phi_{1,n}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} \quad (3.114)$$

verlangen. Gleichung (3.112) impliziert $c_j^{(k+1)} = c_{j+k}^{(0)}$. Man vergleiche auch Gl. (3.39).

Wenn $\phi_{j,n}^{(0)}$ gegeben ist, kann man die Gln. (3.113) und (3.114) als Definition von $\delta_n^{(k)}$ auffassen. Explizit gilt dann

$$\begin{aligned} \delta_n^{(k)} &= \Delta \phi_{1,n}^{(k)}, \\ &= \Delta \nabla_n^{(k-1)} \phi_{2,n}^{(k-1)}, \\ &= \Delta \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \phi_{3,n}^{(k-2)}, \\ &\quad \vdots \\ &= \Delta \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} \phi_{k+1,n}^{(0)}. \end{aligned} \quad (3.115)$$

Wir bemerken, daß ein Iterationsschritt den führenden Koeffizienten $c_0^{(k)} = c_k^{(0)}$ in Gl. (3.110) eliminiert. Folglich gilt

$$s = s_n^{(K)} \quad (3.116)$$

für Modellfolgen vom Typ (3.109) oder (3.110). Das bedeutet, daß die \mathcal{J} -Transformation für die Modellfolge

$$N_n^{(0)} = s D_n^{(0)} + \sum_{j=0}^{K-1} c_j^{(0)} \phi_{j,n}^{(0)} \quad (3.117)$$

exakt ist. Dies kann mit der Darstellung (3.102) für den Kern in Verbindung gebracht werden. Setzt man

$$\begin{aligned}\phi_{0,n}^{(0)} &= 1, \\ \phi_{1,n}^{(0)} &= \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)}, \\ \phi_{2,n}^{(0)} &= \sum_{n_1=0}^{n-1} \delta_{n_1}^{(0)} \sum_{n_2=0}^{n_1-1} \delta_{n_2}^{(1)}, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{3.118}$$

so erhält man durch Differenzenbildung und Anwendung der Operatoren (3.39)

$$\begin{aligned}\Delta \phi_{1,n}^{(0)} &= \delta_n^{(0)}, \\ \Delta \nabla_n^{(0)} \phi_{2,n}^{(0)} &= \delta_n^{(1)}, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{3.119}$$

und damit Gl. (3.115). Die Beziehungen (3.118) können zu

$$\begin{aligned}\phi_{0,n}^{(k)} &= 1, \\ \phi_{1,n}^{(k)} &= \sum_{n_{k+1}=0}^{n-1} \delta_{n_{k+1}}^{(k)}, \\ \phi_{2,n}^{(k)} &= \sum_{n_{k+1}=0}^{n-1} \delta_{n_{k+1}}^{(k)} \sum_{n_{k+2}=0}^{n_{k+1}-1} \delta_{n_{k+2}}^{(k+1)}, \\ &\vdots\end{aligned}\tag{3.120}$$

verallgemeinert werden, wie man unter Verwendung von (3.118) und (3.113) einsieht.

Wir bemerken, daß die Modellfolgen (3.109) für verschiedene Werte von k die Hierarchie für die \mathcal{J} -Transformation darstellen, wobei die zugrundeliegende einfache Folgentransformation durch Gl. (3.11) gegeben ist. Hierbei treten renormierte Parameter $\omega_n^{(k)}$, $c_j^{(k)}$ und $\phi_{j,n}^{(k)}$ auf. Wenn die Beziehungen (3.113) und (3.114) gelten, ist nach den vorangegangenen Überlegungen die \mathcal{J} -Transformation konsistent mit dieser Hierarchie im Sinne von Abschnitt 3.2.

3.3.5 Determinantendarstellungen

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß man im Falle der \mathcal{J} -Transformation explizite Determinantendarstellungen angeben kann, was für viele andere iterative Verfahren nicht möglich war. Diese Darstellungen sind für theoretische Untersuchungen der \mathcal{J} -Transformation bedeutsam. Für die Herleitung der Darstellungen werden nur elementare Aussagen über Determinanten verwendet.

Für gegebene Größen $\delta_n^{(k)}$ benutzen wir (3.120) als Definition der Größen $\phi_n^{(k)}$. Außerdem benutzen wir die Tatsache, daß die Folgen $\{\phi_{j,n}^{(k)}\}$ und $\{c_j^{(k)} = c_{j+k}\}$ Lösungen

der Gleichungen (3.112), (3.113) und (3.114) für gegebene Folgen $\{\delta_n^{(k)}\}$ und gegebene Konstansten $c_j = c_j^{(0)}$ aus Satz 3.11 sind.

Wir wollen die Darstellung

$$s_n^{(K)} = \frac{\begin{vmatrix} N_n^{(k)} & \cdots & N_{n+K-k}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{K-k-1,n+K-k}^{(k)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} D_n^{(k)} & \cdots & D_{n+K-k}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{K-k-1,n+K-k}^{(k)} \end{vmatrix}} \quad (3.121)$$

für $0 \leq k \leq K$ herleiten. Der Spezialfall

$$s_n^{(k)} = \frac{\begin{vmatrix} N_n^{(0)} & \cdots & N_{n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} D_n^{(0)} & \cdots & D_{n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} s_n/\omega_n & \cdots & s_{n+k}/\omega_{n+k} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1/\omega_n & \cdots & 1/\omega_{n+k} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} \quad (3.122)$$

ergibt sich dann mit Gl. (3.38). Ferner sollen Determinantendarstellungen für die $\phi_{j,n}^{(k)}$ gefunden werden.

Wir betrachten die Determinante im Zähler der Darstellung (3.121). Durch Subtraktion von Spalten erhält man die folgenden Ausdrücke:

$$\begin{vmatrix} N_n^{(k)} & \cdots & N_{n+K-k}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{K-k-1,n+K-k}^{(k)} \end{vmatrix} =$$

$$\begin{aligned}
&= \begin{vmatrix} N_n^{(k)} & \cdots & N_{n+K-k-1}^{(k)} & \Delta N_{n+K-k-1}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k-1}^{(k)} & \Delta \phi_{0,n+K-k-1}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{K-k-1,n+K-k-1}^{(k)} & \Delta \phi_{K-k-1,n+K-k-1}^{(k)} \end{vmatrix} \\
&= \begin{vmatrix} N_n^{(k)} & \Delta N_n^{(k)} & \cdots & \Delta N_{n+K-k-1}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \Delta \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \Delta \phi_{0,n+K-k-1}^{(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \Delta \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \Delta \phi_{K-k-1,n+K-k-1}^{(k)} \end{vmatrix}. \tag{3.123}
\end{aligned}$$

Unter Verwendung von $\phi_{0,n}^{(k)} = 1$ und $\Delta \phi_{0,n}^{(k)} = 0$ kann man die letzte Determinante nach der zweiten Zeile entwickeln. Mit Gl. (3.38) und (3.113) kann man den Faktor $\delta_{n+j}^{(k)}$ der j -ten Spalte ($0 \leq j \leq K-k-1$) der entstehenden kleineren Determinante gemäß

$$\begin{aligned}
&\begin{vmatrix} N_n^{(k)} & \cdots & N_{n+K-k}^{(k)} \\ \phi_{0,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \phi_{K-k-1,n+K-k}^{(k)} \end{vmatrix} = \\
&= -\phi_{0,n}^{(k)} \begin{vmatrix} \Delta N_n^{(k)} & \cdots & \Delta N_{n+K-k-1}^{(k)} \\ \Delta \phi_{1,n}^{(k)} & \cdots & \Delta \phi_{1,n+K-k-1}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta \phi_{K-k-1,n}^{(k)} & \cdots & \Delta \phi_{K-k-1,n+K-k-1}^{(k)} \end{vmatrix} \\
&= -\prod_{j=0}^{K-k-1} \delta_{n+j}^{(k)} \begin{vmatrix} N_n^{(k)} p & \cdots & N_{n+K-k-1}^{(k+1)} \\ \phi_{0,n}^{(k+1)} & \cdots & \phi_{0,n+K-k-1}^{(k+1)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{K-k-2,n}^{(k+1)} & \cdots & \phi_{K-k-2,n+K-k-1}^{(k+1)} \end{vmatrix} \tag{3.124}
\end{aligned}$$

abspalten.

Verwendet man Gl. (3.124) induktiv, so erhält man die Darstellungen

$$N_n^{(K)} = -\frac{1}{\delta_n^{(K-1)}} \begin{vmatrix} N_n^{(K-1)} & N_{n+1}^{(K-1)} \\ \phi_{0,n}^{(K-1)} & \phi_{0,n+1}^{(K-1)} \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\delta_n^{(K-1)} \prod_{j=0}^1 \delta_{n+j}^{(K-2)}} \begin{vmatrix} N_n^{(K-2)} & \cdots & N_{n+2}^{(K-2)} \\ \phi_{0,n}^{(K-2)} & \cdots & \phi_{0,n+2}^{(K-2)} \\ \phi_{1,n}^{(K-2)} & \cdots & \phi_{1,n+2}^{(K-2)} \end{vmatrix} \\
&= \frac{(-1)^k}{\prod_{m=1}^k \prod_{j=0}^{m-1} \delta_{n+j}^{(K-m)}} \begin{vmatrix} N_n^{(K-k)} & \cdots & N_{n+k}^{(K-k)} \\ \phi_{0,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(K-k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(K-k)} \end{vmatrix} \quad (3.125)
\end{aligned}$$

und folglich

$$N_n^{(k)} = \frac{(-1)^k}{\prod_{m=1}^k \prod_{j=0}^{m-1} \delta_{n+j}^{(k-m)}} \begin{vmatrix} N_n^{(0)} & \cdots & N_{n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}. \quad (3.126)$$

Dies gilt auch für die Nennerdeterminanten, wenn alle $N_n^{(k)}$ durch $D_n^{(k)}$ ersetzt werden.

Die Vorfaktoren dieser Darstellungen sollen umgeschrieben werden. Ferner sollen noch Determinantendarstellungen für die $\phi_{j,n}^{(k)}$ gefunden werden, die auf dem Rekursionsschema (3.113) und (3.114) basieren. Da die Gleichungen (3.113) und das Rekursionsschema (3.38) für die Berechnung von Zählern und Nennern der \mathcal{J} -Transformation sich sehr ähneln, überrascht es nicht, daß es Determinantendarstellungen

$$\begin{aligned}
\phi_{j,n}^{(K)} &= \frac{1}{\delta_n^{(K-1)}} \begin{vmatrix} \phi_{j+1,n}^{(K-1)} & \phi_{j+1,n+1}^{(K-1)} \\ \phi_{0,n}^{(K-1)} & \phi_{0,n+1}^{(K-1)} \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{\delta_n^{(K-1)} \prod_{\ell=0}^1 \delta_{n+\ell}^{(K-2)}} \begin{vmatrix} \phi_{j+2,n}^{(K-2)} & \cdots & \phi_{j+2,n+2}^{(K-2)} \\ \phi_{0,n}^{(K-2)} & \cdots & \phi_{0,n+2}^{(K-2)} \\ \phi_{1,n}^{(K-2)} & \cdots & \phi_{1,n+2}^{(K-2)} \end{vmatrix} \\
&= \frac{(-1)^k}{\prod_{m=1}^k \prod_{\ell=0}^{m-1} \delta_{n+\ell}^{(K-m)}} \begin{vmatrix} \phi_{j+k,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{j+k,n+k}^{(K-k)} \\ \phi_{0,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(K-k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(K-k)} \end{vmatrix} \quad (3.127)
\end{aligned}$$

der $\phi_{j,n}^{(k)}$ gibt, die den Darstellungen (3.125) strukturell verwandt sind. Auf den Spezialfall

$$\phi_{j,n}^{(k)} = \frac{(-1)^k}{\prod_{m=1}^k \prod_{\ell=0}^{m-1} \delta_{n+\ell}^{(k-m)}} \begin{vmatrix} \phi_{j+k,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{j+k,n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix} \quad (3.128)$$

sei hingewiesen. Wegen $\phi_{0,n}^{(k)} = 1$ impliziert Gl. (3.127)

$$(-1)^k \prod_{m=1}^k \prod_{\ell=0}^{m-1} \delta_{n+\ell}^{(K-m)} = \begin{vmatrix} \phi_{k,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{k,n+k}^{(K-k)} \\ \phi_{0,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(K-k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(K-k)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(K-k)} \end{vmatrix}. \quad (3.129)$$

Diese Gleichung gilt für $1 \leq k \leq K$. Mit Gl. (3.129) kann man die Ausdrücke für $N_n^{(k)}$ und $\phi_{j,n}^{(k)}$ umschreiben:

$$N_n^{(k)} = \frac{\begin{vmatrix} N_n^{(0)} & \cdots & N_{n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k,n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} N_n^{(\kappa)} & \cdots & N_{n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k-\kappa,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}} \quad (3.130)$$

für $0 \leq \kappa \leq k$ und

$$\phi_{j,n}^{(k)} = \frac{\begin{vmatrix} \phi_{j+k,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{j+k,n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k,n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} \phi_{j+k-\kappa,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{j+k-\kappa,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k-\kappa,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}}. \quad (3.131)$$

Aus Gl. (3.130) kann man eine völlig analoge Darstellung für die $D_n^{(k)}$ gewinnen, indem man einfach alle N durch D ersetzt. Dies ist erlaubt, da die D die gleichen Rekursionsbeziehungen wie die N erfüllen. Man erhält

$$D_n^{(k)} = \frac{\begin{vmatrix} D_n^{(0)} & \cdots & D_{n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k,n+k}^{(0)} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} D_n^{(\kappa)} & \cdots & D_{n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \phi_{k-\kappa,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \phi_{0,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{0,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-\kappa-1,n}^{(\kappa)} & \cdots & \phi_{k-\kappa-1,n+k-\kappa}^{(\kappa)} \end{vmatrix}}. \quad (3.132)$$

Dividiert man Gl. (3.130) durch die letzte Gleichung, so erhält man Gl. (3.121).

In den Determinantendarstellungen (3.130) und (3.132) kann man auch Gl. (3.38) verwenden, um alle $N_{n+j}^{(0)}$ and $D_{n+j}^{(0)}$ durch s_{n+j} und ω_{n+j} auszudrücken.

Dies zeigt, daß die Darstellungen (3.121) und (3.122) von $s_n^{(k)}$ als Quotient zweier Determinanten unter alleiniger Verwendung der Rekursionsbeziehungen (3.38) für Zähler und Nenner hergeleitet werden können. Folglich sind die Gleichungen (3.121) und (3.122) auch ohne irgendwelche Annahmen über Modellfolgen gültig.

Wir bemerken, daß es ziemlich ähnliche Darstellungen für den E -Algorithmus gibt. [59, Abschn. 2.1]

Es sei betont, daß die Determinantendarstellungen (3.121), (3.122), (3.130) und (3.132) der \mathcal{J} -Transformation vollkommen explizit sind, da man die Definitionen (3.120) verwenden kann, um die $\phi_{j,n}^{(k)}$ durch die $\delta_n^{(k)}$ auszudrücken.

Die Determinantendarstellungen kann man zu Satz 3.11 für den Kern der \mathcal{J} -Transformation in Verbindung bringen. Verwendet man die Darstellung (3.122), so erhält man den Kern aufgrund der Beobachtung, daß

$$s_n^{(k)} = s + \frac{\begin{vmatrix} (s_n - s)/\omega_n & \cdots & (s_{n+k} - s)/\omega_{n+k} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1/\omega_n & \cdots & 1/\omega_{n+k} \\ \phi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \phi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} \quad (3.133)$$

gilt. Die Zählerdeterminante in Gl. (3.133) verschwindet, wenn die erste Zeile eine Linearkombination der folgenden Zeilen ist. Dies ist für Folgen der Form (3.102) aufgrund der Definition (3.120) der $\phi_{j,n}^{(0)}$.

Viele der oben untersuchten Eigenschaften der \mathcal{J} -Transformation kann man ebenso unter Verwendung der Determinantendarstellungen ableiten.

Schließlich soll die Verbindung zu der Theorie von Brezinski und Walz [65] herausgearbeitet werden. Diese Theorie gilt für dreiecksförmige Rekursionen der Form (3.51). Für die \mathcal{J} -Transformation gilt

$$s_n^{(k+1)} = (\omega_{n+1}^{(k)} s_n^{(k)} - \omega_n^{(k)} s_{n+1}^{(k)}) / (\omega_{n+1}^{(k)} - \omega_n^{(k)}) . \quad (3.134)$$

Also ist die \mathcal{J} -Transformation von der Form (3.51) mit

$$\lambda_n^k = \omega_{n+1}^{(k-1)} / (\omega_{n+1}^{(k-1)} - \omega_n^{(k-1)}) , \quad \mu_n^k = -\omega_n^{(k-1)} / (\omega_{n+1}^{(k-1)} - \omega_n^{(k-1)}) . \quad (3.135)$$

Es gilt demnach

$$\lambda_n^k + \mu_n^k = 1 . \quad (3.136)$$

Lemma 2.2 aus [65] impliziert daher, daß Zahlen $\alpha_{i,\nu}^k$ existieren, so daß

$$T_\nu^k = \sum_{i=\nu}^{\nu+k} \alpha_{i,\nu}^k T_i \quad (3.137)$$

gilt. Dieses Lemma gibt auch Rekursionsbeziehungen für die Koeffizienten $\alpha_{i,\nu}^k$ an. In Verbindung mit Gl. (3.136) folgt $\sum_{i=n}^{n+k} \alpha_{i,n}^k = 1$ für die \mathcal{J} -Transformation. Die Determinantendarstellung (3.122) liefert durch Entwicklung der Zählerdeterminante nach der ersten Zeile sofort explizite Ausdrücke für die $\alpha_{i,n}^k$. Die Größen $\alpha_{i,\nu}^k$ sind wichtig, da sie — für den Raum Σ aller Funktionen σ auf einer Untermenge $Z = \{z_i\}_{i \in \mathbb{Z}}$ von \mathbb{R} — das lineare Funktional

$$\mathcal{T}_\nu^k(\sigma) = \sum_{i=\nu}^{\nu+k} \alpha_{i,\nu}^k \sigma(z_i) \quad (3.138)$$

definieren, das sogenannte *Referenzfunktional* [65]. Im Falle der \mathcal{J} -Transformation folgt aus Gl. (3.122) daß das Referenzfunktional die explizite Form

$$\mathcal{T}_n^k(\sigma) = \frac{\begin{vmatrix} \frac{\sigma(z_n)}{\omega_n} & \cdots & \frac{\sigma(z_{n+k})}{\omega_{n+k}} \\ \varphi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \varphi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \varphi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1/\omega_n & \cdots & 1/\omega_{n+k} \\ \varphi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \varphi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \varphi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} = \frac{\begin{vmatrix} \sigma(z_n) & \cdots & \sigma(z_{n+k}) \\ \omega_n \varphi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \omega_{n+k} \varphi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_n \varphi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \omega_{n+k} \varphi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \omega_n \varphi_{0,n}^{(0)} & \cdots & \omega_{n+k} \varphi_{0,n+k}^{(0)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega_n \varphi_{k-1,n}^{(0)} & \cdots & \omega_{n+k} \varphi_{k-1,n+k}^{(0)} \end{vmatrix}} \quad (3.139)$$

hat. Hier wurde am Schluß $1/\omega_{n+j}$ aus der $(j+1)$ -ten Spalte für $j = 0, 1, \dots, k$ als Faktor abgespalten, jeweils in der Zähler- und der Nennerdeterminante. Man definiere Funktionen $\sigma_0, \sigma_1, \dots, \sigma_k$ über

$$\sigma_0(z_j) = 1, \quad \sigma_\kappa(z_j) = \omega_j \varphi_{\kappa-1, j}^{(0)}, \quad 0 < \kappa \leq k. \quad (3.140)$$

Gleichung (3.139) zeigt, daß diese Funktionen einen *charakteristischen Raum* im Sinne von Lemma 3.1 aus [65] für das charakteristische Funktional \mathcal{T}_n^k der \mathcal{J} -Transformation aufspannen, wobei die Größen $\omega_n^k = 1$ wie in [65] definiert sind und nicht mit unseren Größen $\omega_n^{(k)}$ verwechselt werden sollten. Es sei bemerkt, daß mit dieser Wahl des charakteristischen Raumes und für $\omega_n^k = 1$ die Darstellung (3.139) genau von der Form ist, die in Theorem 3.2 aus [65] verlangt wird. Eine interessante Beobachtung ist das Ergebnis

$$\mathcal{T}_n^k(\sigma_{k+1}) = 1/D_n^{(k)}, \quad (3.141)$$

das direkt aus der Definition (3.140) in Verbindung mit Gl. (3.120) und den Determinantendarstellungen (3.132) und (3.139) folgt.

Das Hauptproblem der Theorie von Brezinski und Walz, nämlich die Koeffizienten $\alpha_{i, \nu}^k$ und den charakteristischen Raum des Referenzfunktionales zu bestimmen, ist also im Falle der \mathcal{J} -Transformation vollständig durch die Angabe der Determinantendarstellungen gelöst.

3.3.6 Konvergenzeigenschaften

In diesem Abschnitt behandeln wir einige analytische Resultate zu den Konvergenzeigenschaften der \mathcal{J} -Transformation. Wenn nicht anders angegeben, betrachten wir beliebige, aber fest gewählte $\delta_n^{(k)}$.

Zunächst erinnern wir an die Sätze 3.11 und 3.9, die Aussagen beinhalten, wann die \mathcal{J} -Transformation exakt ist.

Die folgenden beiden Sätze geben Bedingungen an, unter denen lineare Konvergenz beschleunigt wird.

Satz 3.12

Man nehme an, daß für die Folgen $\{s_n\}$ and $\{\omega_n\}$

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} s_n &= s, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n - s}{\omega_n} &= c, \quad c \neq 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega_{n+1}}{\omega_n} &= \rho, \quad 0 < |\rho| < 1. \end{aligned} \quad (3.142)$$

gilt. Wenn $(1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$, wobei $\overset{\circ}{Y}_k$ in Gl. (3.68) definiert ist, und falls die Grenzwerte Φ_j aus Gl. (3.63) für alle $j \leq k \in \mathbb{N}$ existieren, dann beschleunigt die $\mathcal{J}_n^{(k)}$ -Transformation die Konvergenz der Folge $\{s_n\}$. Die Bedingung $(1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$ kann ersetzt werden durch die Bedingung, daß ρ von allen Φ_j für $0 \leq j \leq k$ verschieden ist.

Beweis: Dies folgt aus Satz 3.5 und Lemma 3.7 in Verbindung mit [368, Theorem 12-14, S. 308]. Die Äquivalenz der beiden Bedingungen, die im letzten Satz behauptet wird, ergibt sich aus Lemma 3.6. \square

Ein einfaches Korollar ist der folgende Satz:

Satz 3.13

Man nehme folgendes für die Folge $\{s_n\}$ an:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} s_n = s, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_{n+1} - s}{s_n - s} = \rho, \quad 0 < |\rho| < 1. \quad (3.143)$$

Wenn $(1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$, wobei $\overset{\circ}{Y}_k$ in Gl. (3.68) definiert ist, und falls die Grenzwerte Φ_j aus Gl. (3.63) für alle $j \leq k \in \mathbb{N}$ existieren, dann beschleunigen die t -Variante $\mathcal{T}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\})$ aus Gl. (3.27) und die \tilde{t} -Variante $\tilde{\mathcal{T}}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{r_n^{(k)}\})$ aus Gl. (3.28) die Konvergenz linearkonvergenter Folgen $\{s_n\}$. Die Bedingung $(1, \rho, \rho^2, \dots, \rho^k) \in \overset{\circ}{Y}_k$ kann ersetzt werden durch die Bedingung, daß ρ von allen Φ_j für $0 \leq j \leq k$ verschieden ist.

Beweis: Angesichts von Satz 3.12 muß man nur zeigen, daß

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n - s}{\omega_n} &= c, & c \neq 0, \\ \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega_{n+1}}{\omega_n} &= \rho, & 0 < |\rho| < 1 \end{aligned} \quad (3.144)$$

erfüllt ist. Die zweite Gleichung folgt aus [394, Theorem 1, S. 6]. Die erste ergibt sich aus [394, S. 6, Gl. (4)]

$$\Delta s_n \sim (\rho - 1)(s_n - s), \quad n \rightarrow \infty, \quad (3.145)$$

die $c = \rho/(\rho - 1)$ im Fall der t -Variante und $c = 1/(\rho - 1)$ im Fall der \tilde{t} -Variante impliziert. \square

Wir bemerken mit Bezug auf Satz 3.13, daß die Bedingung, daß ρ von allen Φ_k verschieden ist, für die t - und \tilde{t} -Varianten der ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation fallengelassen werden kann, da dann $\Phi_j = 1$ gilt für alle j .

Der folgende Satz gibt eine Konvergenzaussage für alternierende Vorzeichen der ω_n und gleiche Vorzeichen der $\delta_n^{(k)}$. Diese Annahmen sind beispielsweise im Fall der ${}_p\mathbf{T}$ -Transformation aus Gl. (3.30) bei Anwendung auf die Folge der Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n (-1)^j a_j, \quad a_j > 0 \quad (3.146)$$

einer alternierenden Reihe erfüllt. Wichtige Beispiele solcher Reihen sind die an anderer Stelle diskutierten Stieltjes-Reihen.

Satz 3.14

Man nehme an, daß die folgenden Aussagen zutreffen:

(A-0) Die Folge $\{s_n\}$ hat den (Anti)limes s .

(A-1a) Für jedes n haben die Elemente der Folge $\{\omega_n\}$ strikt alternierende Vorzeichen und verschwinden nicht.

(A-1b) Für alle n und k haben die Elemente der Folgen $\{\delta_n^{(k)}\} = \{\Delta r_n^{(k)}\}$ gleiches Vorzeichen und verschwinden nicht.

(A-2) Für alle $n \in \mathbb{N}_0$ kann der Quotient $(s_n - s)/\omega_n$ als Reihe der Form

$$\frac{s_n - s}{\omega_n} = c_0 + \sum_{j=1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_1 > n_2 > \dots > n_j} \delta_{n_1}^{(0)} \delta_{n_2}^{(1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)} \quad (3.147)$$

mit $c_0 \neq 0$ dargestellt werden.

Dann gelten die folgenden Aussagen für $s_n^{(k)} = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\})$:

a) Der Fehler $s_n^{(k)} - s$ erfüllt

$$s_n^{(k)} - s = \frac{b_n^{(k)}}{\nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [1/\omega_n]} \quad (3.148)$$

mit

$$b_n^{(k)} = c_k + \sum_{j=k+1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_{k+1} > n_{k+2} > \dots > n_j} \delta_{n_{k+1}}^{(k)} \delta_{n_{k+2}}^{(k+1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)}. \quad (3.149)$$

b) Der Betrag des Fehlers $s_n^{(k)} - s$ ist beschränkt gemäß

$$|s_n^{(k)} - s| \leq |\omega_n b_n^{(k)} \delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}|. \quad (3.150)$$

c) Für große n gilt die Abschätzung

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O(\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}), \quad (3.151)$$

wenn $b_n^{(k)} = O(1)$ und $(s_n - s)/\omega_n = O(1)$ für $n \rightarrow \infty$.

Beweis:

a) Dies folgt aus Lemma 3.10 und Gl. (3.41b).

b) Dies folgt aus Gl. (3.148) und der Beobachtung, daß Annahmen (A-1a) und (A-1b) implizieren, daß alle Terme dasselbe Vorzeichen haben, die durch Entwicklung von

$$\sigma = \nabla_n^{(k-1)} \nabla_n^{(k-2)} \dots \nabla_n^{(0)} [1/\omega_n] \quad (3.152)$$

entstehen. Folglich ist der Betrag von σ größer gleich dem Betrag irgendeines der Terme. Nimmt man den Term, der ω_n enthält, so folgt

$$|\sigma| \geq \left| \frac{1}{\omega_n \delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}} \right|. \quad (3.153)$$

c) Dies folgt direkt aus Punkt b).

□

Dieser Satz erlaubt eine Abschätzung des Fehlers der Extrapolation für den Fall alternierender Reihen. Der Rest dieses Abschnittes dient der Verallgemeinerung dieses Satzes. Die Grundlage für die folgenden Betrachtungen ist die Gleichung

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = \frac{\prod_{l=0}^{k-1} \delta_n^{(l)}}{\prod_{l=0}^{k-1} [\omega_n^{(l)} / \omega_{n+1}^{(l)} - 1]} \frac{b_n^{(k)}}{b_n^{(0)}} = \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \delta_n^{(l)} \right\} \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \left[\frac{\omega_{n+1}^{(l)}}{e_n^{(l)} \omega_n^{(l)}} \right] \right\} \left\{ \frac{b_n^{(k)}}{b_n^{(0)}} \right\} \quad (3.154)$$

die in Lemma B.1 im Anhang B bewiesen wird. Es werden die Abkürzungen $e_n^{(k)} = 1 - \omega_{n+1}^{(k)} / \omega_n^{(k)}$ und $b_n^{(k)} = (s_n^{(k)} - s) / \omega_n^{(k)}$ verwendet.

Gleichung (3.154) ist eine wichtige Formel, die das Konvergenzverhalten der \mathcal{J} -Transformation für große n abzuschätzen erlaubt. In Lemma B.2 im Anhang B werden Aussagen darüber getroffen, welche der in Gl. (3.154) auftretenden Größen Grenzwerte für $n \rightarrow \infty$ haben.

Man nehme an, daß Annahme (A-2) aus Satz 3.14 gilt. Man beachte, daß die Formel (3.102) für den Kern als Partialsumme der unendlichen Reihe in (A-2) aufgefaßt werden kann. Lemma 3.10 impliziert nun

$$b_n^{(k)} = c_k + \sum_{j=k+1}^{\infty} c_j \sum_{n > n_{k+1} > n_{k+2} > \dots > n_j} \delta_{n_{k+1}}^{(k)} \delta_{n_{k+2}}^{(k+1)} \dots \delta_{n_j}^{(j-1)} \quad (3.155)$$

Die Annahme (3.156) im folgenden Satz ist also sinnvoll.

Satz 3.15

Die Annahme (A-0) aus Satz 3.14 gelte. Die folgenden Bedingungen seien zusätzlich erfüllt:

(B-1) Der Grenzwert

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n^{(k)}}{b_n^{(0)}} = B_k \quad (3.156)$$

existiert und ist endlich.

(B-2) Die Grenzwerte

$$\Omega_k = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega_{n+1}^{(k)}}{\omega_n^{(k)}} \neq 0 \quad (3.157)$$

und

$$F_k = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\delta_{n+1}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} \neq 0, \quad (3.158)$$

existieren für alle $k \in \mathbb{N}_0$.

Dann gelten die folgenden Aussagen für $s_n^{(k)} = \mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\})$:

a) Ist $\Omega_0 \notin \{\Phi_0 = 1, \Phi_1, \dots, \Phi_{k-1}\}$, dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \delta_n^{(l)} \right\}^{-1} = B_k \frac{[\Omega_0]^k}{\prod_{l=0}^{k-1} (\Phi_l - \Omega_0)} \quad (3.159)$$

und demnach auch

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O(\delta_n^{(0)} \delta_n^{(1)} \dots \delta_n^{(k-1)}) \quad (3.160)$$

für $n \rightarrow \infty$.

b) Gilt $\Omega_l = 1$ für $l \in \{0, 1, 2, \dots, k\}$, so folgt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \frac{\delta_n^{(l)}}{e_n^{(l)}} \right\}^{-1} = B_k \quad (3.161)$$

und demnach gilt

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O\left(\prod_{l=0}^{k-1} \frac{\delta_n^{(l)}}{e_n^{(l)}}\right) \quad (3.162)$$

für $n \rightarrow \infty$.

Beweis: Die Behauptungen folgen aus Gl. (3.154). Zusätzlich muß man Lemma B.2 des Anhangs benutzen. Der Beweis wird vervollständigt durch Anwendung von Gl. (B.8b) im Falle a) und von Gl. (B.10) im Falle b). \square

Dieser Satz ist das zentrale Resultat dieses Abschnittes. Er ergibt durch Spezialisierung auf den wichtigen Fall der ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation die beiden folgenden Sätze als Korollare.

Satz 3.16

Die folgenden Annahmen seien erfüllt:

(C-1) Sei $\beta > 0$, $p \geq 1$ und $\delta_n^{(k)} = \Delta[(n + \beta + (p - 1)k)^{-1}]$. Es handelt sich also um die ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation. Folglich gelten die Gleichungen $F_k = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_{n+1}^{(k)} / \delta_n^{(k)} = 1$ und $\Phi_k = 1$ für alle k (vgl. Gl. (3.63)).

(C-2) Die Annahmen (A-2) aus Satz 3.14 und (B-1) aus Satz 3.15 seien erfüllt unter der Annahme (C-1) für $\delta_n^{(k)}$.

(C-3) Der Grenzwert $\Omega_0 = \lim_{n \rightarrow \infty} \omega_{n+1}^{(k)} / \omega_n^{(k)}$ existiert und erfüllt $\Omega_0 \notin \{0, 1\}$. Aufgrund von Lemma B.2, Gl. (B.8b) existieren also alle Grenzwerte Ω_k für $k \in \mathbb{N}$ erfüllen $\Omega_k = \Omega_0$.

Dann gilt für die Transformation $s_n^{(k)} = {}_p\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ die Gleichung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \delta_n^{(l)} \right\}^{-1} = B_k \left\{ \frac{\Omega_0}{1 - \Omega_0} \right\}^k \quad (3.163)$$

und folglich auch

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O\left((n + \beta)^{-2k}\right) \quad (3.164)$$

in der Grenze $n \rightarrow \infty$.

Satz 3.16 kann im Falle linearer Konvergenz angewendet werden. Denn dann gilt $0 < |\Omega_0| < 1$, wie man im Beweis von Satz 3.13 sah.

Satz 3.17

Die folgenden Annahmen seien erfüllt:

(D-1) Sei $\beta > 0$, $p \geq 1$ und $\delta_n^{(k)} = \Delta[(n + \beta + (p - 1)k)^{-1}]$. Es handelt sich also um die ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation. Folglich gelten die Gleichungen $F_k = \lim_{n \rightarrow \infty} \delta_{n+1}^{(k)} / \delta_n^{(k)} = 1$ und $\Phi_k = 1$ für alle k (vgl. Gl. (3.63)).

(D-2) Die Annahmen (A-2) aus Satz 3.14 und (B-1) aus Satz 3.15 seien erfüllt unter der Annahme (C-1) für $\delta_n^{(k)}$.

(D-3) Es gibt Konstanten $a_l^{(j)}$, $j = 1, 2$, so daß

$$e_n^{(l)} = 1 - \omega_{n+1}^{(l)} / \omega_n^{(l)} = \frac{a_l^{(1)}}{n + \beta} + \frac{a_l^{(2)}}{(n + \beta)^2} + O((n + \beta)^{-3}) \quad (3.165)$$

für $l = 0$ gilt. Dann gilt diese Gleichung und damit $\Omega_l = 1$ für $l \in \{0, 1, 2, \dots, k\}$. Es gelte ferner $a_l^{(1)} \neq 0$ für $l \in \{0, 1, 2, \dots, k - 1\}$.

Dann erfüllt die Transformation $s_n^{(k)} = {}_p\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ die Gleichung

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \frac{\delta_n^{(l)}}{e_n^{(l)}} \right\}^{-1} = B_k \quad (3.166)$$

und folglich gilt

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O\left((n + \beta)^{-k}\right) \quad (3.167)$$

für $n \rightarrow \infty$.

Beweis: Die Gültigkeit von Gl. (3.165) für $l = 0$ kann aufgrund von Lemma B.3 im Anhang auf $l \in \{0, 1, 2, \dots, k\}$ ausgedehnt werden. Dann ergibt sich $\Omega_l = 1$ aus den Definitionen. Also kann Aussage b) von Satz 3.15 angewandt werden. Damit folgt Gl. (3.167) aus $\delta_n^{(l)} = O((n + \beta)^{-2})$ (Aussage b) von Lemma B.3) und $e_n^{(l)} = O((n + \beta)^{-1})$. \square

Die Sätze 3.16 und 3.17 können leicht auf alle Varianten der \mathcal{J} -Transformation mit $\delta_n^{(k)} = O((n + \beta)^{-2})$ für $n \rightarrow \infty$ verallgemeinert werden.

Wenn Konstanten $u_0 \neq 0$ und u_1 existieren, so daß

$$\omega_n = (n + \beta)^{-\alpha} \left(u_0 + \frac{u_1}{n + \beta} + O((n + \beta)^{-2}) \right), \quad n \rightarrow \infty \quad (3.168)$$

gilt, dann folgt aus Aussage c) von Lemma B.3 im Anhang, daß Gl. (3.165) für $l = 0$ erfüllt ist. Folglich ist Satz 3.17 wichtig für den Fall, daß Gl. (3.168) gilt, und damit für den Fall logarithmischer Konvergenz. Vergleich der Sätze 3.16 und 3.17 zeigt, daß die Konvergenzordnung, also der negative Exponent von $n + \beta$ in Gl. (3.30) und (3.167), von $2k$ auf k fällt. Lineare Konvergenz läßt sich also effizienter beschleunigen als logarithmische. Ähnliche Aussagen sind für Levin-artige Extrapolationsmethoden bekannt [368, Sätze 13.5, 13.9, 13.11, 13.12, 14.2].

Satz 3.16 zeigt, daß im Falle linearer Konvergenz die ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation dem ϵ -Algorithmus von Wynn [399] überlegen sein sollten. Man betrachte beispielsweise den Fall, daß

$$s_n \sim s + \lambda^n n^\theta \sum_{n=0}^{\infty} c_j / n^j, \quad c_0 \neq 0, \quad n \rightarrow \infty \quad (3.169)$$

eine asymptotische Entwicklung der Folgeelemente s_n ist. Unter den Annahmen $\lambda \neq 1$ und $\theta \notin \{0, 1, \dots, k - 1\}$ folgt ([394, S. 127]; [368, S. 333, Gl. (13.4-7)])

$$\frac{\epsilon_{2k}^{(n)} - s}{s_n - s} = O(n^{-2k}), \quad n \rightarrow \infty. \quad (3.170)$$

Auch hier erhält man also Konvergenzordnung $2k$. Allerdings werden zur Berechnung von $\epsilon_{2k}^{(n)}$ die $2k + 1$ Folgeelemente $\{s_n, \dots, s_{n+2k}\}$ benötigt. Für die Berechnung von ${}_p\mathbf{J}_n^{(k)}$, das die gleiche Konvergenzordnung aufweist, werden jedoch nur die $k + 1$ Folgeelemente $\{s_n, \dots, s_{n+k}\}$ benötigt, wenn man t - und u -Varianten verwendet, und zusätzlich noch das weitere Folgeelement s_{n+k+1} im Falle der \tilde{t} -Variante. Auch dies ist für Levin-artige Verfahren typisch [368, S. 333].

3.3.7 Relation zu anderen Folgentransformationen

Viele bekannte Algorithmen sind für bestimmte Modellfolgen der Form

$$s_n = s + \omega_n \sum_{j=0}^{k-1} d_j \psi_{j,n}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.171)$$

exakt. Diese Modellfolgen können als Varianten des E -Algorithmus aufgefaßt werden, wenn man $g_j(n) = \omega_n \psi_{j,n}$ setzt, wie man durch Vergleich mit (2.16) sieht. In der Praxis sind die $\psi_{j,n}$ in der Regel eine asymptotische Folge für $n \rightarrow \infty$ gemäß $\psi_{j+1,n} = o(\psi_{j,n})$. Um die Beziehung anderer Algorithmen zur \mathcal{J} -Transformation herauszufinden, kann man

versuchen, die Größen $\delta_n^{(k)}$ aus der Definition (3.24) der \mathcal{J} -Transformation als Lösung des Rekursionschemas (3.113) mit den Anfangsbedingungen

$$\phi_{j,n}^{(0)} = \psi_{j,n} \quad (3.172)$$

zu bestimmen. Die mit diesen $\delta_n^{(k)}$ (bzw. $r_n^{(k)}$) berechnete \mathcal{J} -Transformation muß dann identisch sein zu der Folgentransformation mit Kern (3.171).

Es sei hier allerdings betont, daß diese im Prinzip mögliche Vorgehensweise auf der Basis der Modellfolge (3.171) für die \mathcal{J} -Transformation nicht optimal ist. Stattdessen ist die iterative Verwendung viel einfacherer Modellfolgen das Ziel. Wie oben gezeigt, kann man gleich von Beginn an einfache Varianten der $\delta_n^{(k)}$ wählen, die zu relativ komplizierten Ausdrücken für die $\psi_{j,n}$ führen. Dies ist in der Praxis aber meist nicht nachteilig, da man für die meisten Probleme gar nicht *a priori* weiß, welche $\psi_{j,n}$ denn optimal sind. Die Modellfolgen approximieren die Probleme ja nur. Und heuristische Betrachtungen funktionieren, wie wir gesehen haben, auf der Ebene der $\delta_n^{(k)}$ ebenso gut wie auf der der $\psi_{j,n}$. Der Hauptvorteil bei der Verwendung der $\delta_n^{(k)}$ ist, daß sie viel enger mit dem Algorithmus verknüpft sind und daher sehr effiziente Algorithmen resultieren.

Nach der Betonung dieses methodisch wichtigen Punktes kehren wir zurück zum Problem der Berechnung der $\delta_n^{(k)}$ für gegebene $\psi_{j,n}$. Dieses Problem ist im Prinzip durch Gl. (3.115) gelöst. Demnach gibt es ein allgemeines Verfahren, für irgendwelche gegebenen $\psi_{j,n}$ eine geeignete Variante der \mathcal{J} -Transformation mit dem Kern (3.171) zu finden. Das bedeutet, daß die \mathcal{J} -Transformation von ähnlicher Allgemeinheit wie der E -Algorithmus ist. Es gibt auch eine ganze Reihe von Querverbindungen. Dies wird später noch ausführlich diskutiert.

Man sollte jedoch beachten, daß die Operatoren $\nabla_n^{(j)}$ aus Gl. (3.39), die in Gl. (3.115) vorkommen, selbst von bestimmten $\delta_n^{(k)}$ abhängen, die man allerdings vorher berechnen kann. Gleichung (3.115) ist demnach keine explizite Lösung des Problems, kann aber prinzipiell zur numerischen Berechnung aller $\delta_n^{(k)}$ verwendet werden.

Es ist demnach von Interesse zu untersuchen, ob man explizite Lösungen für die $\delta_n^{(k)}$ zumindest in Spezialfällen finden kann. Es gibt einige wichtige Familien asymptotischer Funktionen $\psi_{j,n} = \phi_{j,n}^{(0)}$ für Modellfolgen der Form (3.171):

$$\psi_{j,n} = 1/(n + \beta)_j, \quad (3.173a)$$

$$\psi_{j,n} = \frac{(\gamma\beta^2)^j}{(\gamma n + \beta)_j}, \quad (3.173b)$$

$$\psi_{j,n} = 1/(n + \beta)^j, \quad (3.173c)$$

$$\psi_{j,n} = x_n^j. \quad (3.173d)$$

Wir bemerken, daß Gl. (3.173c) ein Spezialfall von Gl. (3.173d) für $x_n = 1/(n + \beta)$ ist. Ebenso ist Gl. (3.173a) — abgesehen von einem n -unabhängigen Faktor — ein Spezialfall von Gl. (3.173b).

Der für die Analyse einfachste Fall ist Gl. (3.173a). Verwendet man

$$\Delta \frac{1}{(n+\beta)_j} = \frac{-j}{(n+\beta)_{j+1}} \quad (3.174)$$

in Verbindung mit Gln. (3.113) und (3.114), so erhält man nach längerer, aber einfacher Rechnung die Lösungen

$$\phi_{j,n}^{(k)} = \frac{(j+1)_k}{k!} \frac{1}{(n+\beta+2k)_j} \quad (3.175)$$

und

$$r_n^{(k)} = \phi_{1,n}^{(k)} = (k+1) \frac{1}{n+\beta+2k}, \quad \delta_n^{(k)} = -(k+1) \frac{1}{(n+\beta+2k)_2}. \quad (3.176)$$

Gleichung (3.173b) als Generalisierung von Gl. (3.173a) führt auf die Lösungen

$$\delta_n^{(k)} = -(k+1)\beta^2 \gamma^2 \frac{\prod_{j=1}^k (\gamma(n+j) + \beta + k - 1)}{\prod_{j=0}^{k+1} (\gamma(n+j) + \beta + k)} = -(k+1)\beta^2 \frac{(n+1 + (\beta+k-1)/\gamma)_k}{(n + (\beta+k)/\gamma)_{k+2}}. \quad (3.177)$$

Dies kann man durch Induktion unter Verwendung von Gl. (3.115) beweisen.

Im Falle des asymptotischen Systems (3.173d) kann man die Funktionen als dividierte Differenzen ausdrücken. Zur Formulierung dieses Resultats benötigen wir bestimmte weitere Notationen. Die ℓ -te dividierte Differenz einer Funktion $f(x)$ an den Interpolationpunkten $x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+\ell}$ wird im folgenden mit $f[x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+\ell}]$ bezeichnet. Es ist bekannt [342, S. 38, Gl. (2.1.3.5)], daß man dividierte Differenzen rekursiv mittels der Formeln

$$\begin{aligned} f[x_n] &= f(x_n), \\ f[x_n, x_{n+1}, \dots, x_{n+\ell}] &= \frac{f[x_{n+1}, \dots, x_{n+\ell}] - f[x_n, \dots, x_{n+\ell-1}]}{x_{n+\ell} - x_n} \end{aligned} \quad (3.178)$$

berechnen kann, wenn die Interpolationpunkt paarweise verschieden sind. Außerdem sind dividierte Differenzen symmetrische Funktionen ihrer Argument [342, S. 39, Theorem (2.1.3.7)]. Dann gilt der folgende Satz:

Satz 3.18

Sei $g_k(x) = x^k$. Die Lösungen der Rekursionen (3.113) und (3.114) mit den Anfangsbedingungen (3.172) sind im Falle der Gl. (3.173d) durch

$$\phi_{j,n}^{(k)} = g_{j+k}[x_n, \dots, x_{n+k}] \quad (3.179)$$

gegeben. Folglich gilt

$$r_n^{(k)} = \sum_{j=0}^k x_{n+j}, \quad \delta_n^{(k)} = x_{n+k+1} - x_n. \quad (3.180)$$

Beweis: Der Beweis erfolgt durch Induktion nach k . Für $k = 0$ gilt

$$\phi_{j,n}^{(0)} = g_j[x_n] = x_n^j. \quad (3.181)$$

Wenn nun Gl. (3.179) für gegebenes $k \geq 0$ gilt, müssen wir die Gültigkeit für $k + 1$ nachweisen. Differenzenbildung bezüglich n liefert

$$\Delta\phi_{j,n}^{(k)} = (x_{n+k+1} - x_n)g_{j+k}[x_n, \dots, x_{n+k+1}]. \quad (3.182)$$

Mit Gln. (3.113) und (3.114) folgt

$$\phi_{j,n}^{(k+1)} = \frac{g_{j+k+1}[x_n, \dots, x_{n+k+1}]}{g_{k+1}[x_n, \dots, x_{n+k+1}]}. \quad (3.183)$$

Der Beweis von Gl. (3.179) wird vervollständigt durch die Beobachtung, daß für alle n und k die Beziehung $g_k[x_n, \dots, x_{n+k}] = 1$ gilt. Dies ergibt sich aus dem folgenden Lemma 3.19. Die Gültigkeit von Gl. (3.180) ergibt sich aus der Beziehung $r_n^{(k)} = \phi_{1,n}^{(k)} = g_{1+k}[x_n, \dots, x_{n+k}]$ in Verbindung mit Lemma 3.19. \square

Lemma 3.19

Für die dividierten Differenzen der Funktionen $g_k(x) = x^k$, $k \in \mathbb{N}$ an den Punkten x_{n+j} , $j = 0, \dots, k$ gelten die beiden folgenden Beziehungen:

a) $g_k[x_n, \dots, x_{n+k}] = 1.$

b) $g_k[x_n, \dots, x_{n+k-1}] = \sum_{j=0}^{k-1} x_{n+j}.$

Beweis: Es gilt [342, Theorem (2.1.3.6) und Beweis von Theorem (2.1.3.8)]

$$x^k = g_k[x_n] + \dots + g_k[x_n, \dots, x_{n+k-1}] \prod_{j=0}^{k-2} (x - x_{n+j}) + g_k[x_n, \dots, x_{n+k}] \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_{n+j}). \quad (3.184)$$

Koeffizientenvergleich für x^k und x^{k-1} auf beiden Seiten dieser Gleichung ergibt die Behauptung. \square

Als Folgerung aus Satz 3.18 kann man die expliziten Lösungen für $\phi_{j,n}^{(k)}$ für den Fall (3.173c) angeben. Wir betrachten einen etwas allgemeineren Fall:

Satz 3.20

Die Lösungen der Rekursionsbeziehungen (3.113) und (3.114) mit den Anfangsbedingungen (3.172) sind im Falle von

$$\psi_{j,n} = (n + \beta)^{-j\alpha} \quad (3.185)$$

durch

$$\phi_{j,n}^{(k)} = g_{j+k}[(n + \beta)^{-\alpha}, \dots, (n + \beta + k)^{-\alpha}] \quad (3.186)$$

gegeben. In diesem Fall gilt folglich

$$r_n^{(k)} = \sum_{j=0}^k (n + \beta + j)^{-\alpha}, \quad \Delta r_n^{(k)} = -\frac{(n + \beta + k + 1)^\alpha - (n + \beta)^\alpha}{(n + \beta)^\alpha (n + \beta + k + 1)^\alpha}. \quad (3.187)$$

Dies impliziert

$$\delta_n^{(k)} \sim -\frac{(k + 1)\alpha}{(n + \beta)^{\alpha+1}} \quad (3.188)$$

für $n \rightarrow \infty$.

Beweis: Dies folgt aus Satz 3.18, wenn man $x_n = (n + \beta)^{-\alpha}$ setzt. \square

Der Fall (3.173a) ergibt demnach genau die Modellfolgen der Kerns der Folgentransformation (2.55). Der Fall (3.173b) ergibt – abgesehen von irrelevanten n -unabhängigen Vorfaktoren – für $\gamma = \alpha$ und $\beta = \alpha\zeta$ die Modellfolgen, für die die interpolierende Folgentransformation $\mathcal{C}_k^{(n)}(\alpha, \zeta, s_n, \omega_n)$ exakt ist [371]. Der Fall (3.173c) führt auf die Modellfolgen des Kerns der Levin-Transformation [222]. Der Fall (3.173d) ergibt die Modellfolgen des Kerns des generalisierten Richardson-Extrapolationsprozesses, der von Sidi [318] eingeführt wurde. Dieses Verfahren wird auch als W -Algorithmus bezeichnet und wurde auch von anderen Autoren untersucht [368, Abschn. 7.4], [59, S. 71f, 116f]. Der dort angegebene Algorithmus auf der Grundlage dividierter Differenzen ist identisch zum Algorithmus (3.38) mit den Werten $\delta_n^{(k)}$ aus Gl. (3.180). Man sollte beachten, daß daneben natürlich auch die Möglichkeit besteht, den definierenden Algorithmus (3.24) mit diesen Werten der $\delta_n^{(k)}$ für die Berechnung der \mathcal{J} -Transformation zu verwenden. Andererseits zeigt die Querverbindung zum W -Algorithmus, daß man die \mathcal{J} -Transformation auch als eine Verallgemeinerung des Verfahrens der dividierten Differenzen auffassen kann.

Diese Betrachtungen zeigen, daß man die \mathcal{J} -Transformation zur Berechnung vieler bekannter Folgentransformationen heranziehen kann. Für den Fall, daß man die $\delta_n^{(k)}$ kennt oder problemangepaßt wählt, ergeben sich numerisch attraktive Rekursionsverfahren.

Wir diskutieren jetzt die Beziehung der \mathcal{J} -Transformation zum E -Algorithmus. Dessen Kern ist durch (2.16) gegeben. Der E -Algorithmus kann über das Rekursionsschema (2.19) berechnet werden. Dieser Algorithmus benutzt also im Vergleich zur \mathcal{J} -Transformation zusätzliche Regeln (2.19c), die die Berechnung im allgemeinen Fall relativ aufwendig machen. Etwas weniger aufwendig ist der von Ford und Sidi [123] stammende Algorithmus (2.21) zur Berechnung des E -Algorithmus. Die dabei auftretenden Größen Ψ kann man über das Rekursionsverfahren (2.22) berechnen. Dies zeigt Ähnlichkeiten zum alternativen Algorithmus (3.38) zur Berechnung der \mathcal{J} -Transformation. Ein Unterschied ist, daß keine Restabschätzungen ω_n verwendet werden. Wesentlich bedeutsamer ist, daß bei der Berechnung der \mathcal{J} -Transformation die Größen $\delta_n^{(k)}$ im allgemeinen bekannt sind und nicht wie die Größen $\Psi_k^{(n)}$ in (2.22) aufwendig rekursiv berechnet werden müssen. Man sollte im übrigen beachten, daß es Varianten des E -Algorithmus gibt, in die Restabschätzungen ω_n eingehen [58].

Im folgenden wird auf die Beziehung der \mathcal{J} -Transformation zu einigen früheren Arbeiten über iterierte Folgentransformationen eingegangen. Weniger [368, 370] hat Transfor-

mationen untersucht, die durch Iteration von einfachen Transformation der Gestalt

$$\Theta_1^{(n)} = F(\Theta_0^{(n)}, \Theta_0^{(n+1)}, \dots, \Theta_0^{(n+\lambda)}), \quad n \in \mathbb{N}_0, \lambda \in \mathbb{N}, \quad (3.189)$$

mit $\Theta_0^{(n)} = s_n$ entstehen. Im einfachsten Fall erhält man

$$\Theta_{k+1}^{(n)} = F(\Theta_k^{(n)}, \Theta_k^{(n+1)}, \dots, \Theta_k^{(n+\lambda)}), \quad k, n \in \mathbb{N}_0, \quad (3.190)$$

oder — bei Verwendung von explizit k -abhängigen Regeln F_k mit $F_0 = F$ —

$$\Theta_{k+1}^{(n)} = F_k(\Theta_k^{(n)}, \Theta_k^{(n+1)}, \dots, \Theta_k^{(n+\lambda)}), \quad k, n \in \mathbb{N}_0. \quad (3.191)$$

Man sieht auch hier die früher angesprochenen Probleme, daß im allgemeinen die iterierte Folgentransformation durch die zugrundeliegende einfache Transformation nicht eindeutig bestimmt ist. Wenn n -Abhängigkeiten von F auftreten, muß man sogar noch allgemeinere Rekursionsbeziehungen

$$\Theta_{k+1}^{(n)} = F_k^{(n)}(\Theta_k^{(n)}, \Theta_k^{(n+1)}, \dots, \Theta_k^{(n+\lambda)}), \quad k \in \mathbb{N}_0, n \in \mathbb{N}_0 \quad (3.192)$$

zulassen. Dies wurde in [370] am Fall dreier verschiedener Algorithmen diskutiert, die alle durch Iteration der einfachen Folgentransformation $\rho_2^{(n)}$ entstehen. Daß solche Unterschiede nicht nur von akademischer Natur sind, zeigt sich daran [370], daß die numerischen Eigenschaften der drei Transformationen deutlich unterschiedlich sind und nur eine der drei ähnlich gute Extrapolationseigenschaften wie der ρ -Algorithmus von Wynn [400] aufweist.

Wir zeigen jetzt, daß das iterierte Aitken-Verfahren (2.38) mit der Wahl einer bestimmten Hierarchie von Modellfolgen konsistent ist und als Spezialfall der \mathcal{J} -Transformation aufgefaßt werden kann. Dazu formulieren wir das Rekursionsschema (2.38) um und schreiben

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_0^{(n)} &= s_n, & \Omega_0^{(n)} &= \Delta s_n, \\ \mathcal{A}_{k+1}^{(n)} &= \mathcal{A}_k^{(n)} - \frac{\Omega_k^{(n)}}{\Delta \Omega_k^{(n)}} \Delta \mathcal{A}_k^{(n)}, \\ \Omega_{k+1}^{(n)} &= \Delta \mathcal{A}_{k+1}^{(n)}. \end{aligned} \quad (3.193)$$

Ein direkter Vergleich mit der Definition (3.24) der \mathcal{J} -Transformation zeigt, daß das iterierte Aitken-Verfahren der Wahl

$$\delta_n^{(k)} = - \frac{[\Delta \mathcal{A}_{k+1}^{(n)}][\Delta^2 \mathcal{A}_k^{(n)}]}{[\Delta \mathcal{A}_k^{(n)}][\Delta \mathcal{A}_k^{(n+1)}]} \quad (3.194)$$

im Rahmen der \mathcal{J} -Transformation entspricht. Hierzu muß man die Identifikationen $\Delta s_n = \omega_n$, $\Omega_k^{(n)} = \omega_n^{(k)}$ und $\mathcal{A}_k^{(n)} = s_n^{(k)}$ vornehmen. Das iterierte Aitken-Verfahren ist also ein Spezialfall der \mathcal{J} -Transformation. Da man aufgrund von Satz 3.11 weiß, für welche Modellfolgen die \mathcal{J} -Transformation exakt ist, erhält man demnach sofort auch Gleichungen

für die Modellfolgen, für die das iterierte Aitken-Verfahren exakt ist. Allerdings ist zu beachten, daß diese Gleichungen nicht ein $\mathcal{A}_k^{(n)}$ nur in Abhängigkeit von den Folgeelementen s_n ausdrücken. Vielmehr treten in einer Gleichung jeweils mehrere $\mathcal{A}_k^{(n)}$ mit verschiedenen Werten von k und n . Dies ist ähnlich zu den Beziehungen von Hillion [156] für den Kern des iterierten Aitken-Verfahrens.

Interessanterweise hat Weniger [370] die Iteration der einfachen Folgentransformation

$$\tilde{s}_n = s_{n+1} - \frac{\omega_{n+1}[\Delta s_{n+1}]}{\omega_{n+2} - \omega_{n+1}} \quad (3.195)$$

untersucht. Sie ist bis auf eine Indexverschiebung identisch zur Transformation (3.13):

$$\tilde{s}_n = s'_{n+1} . \quad (3.196)$$

Die Transformation (3.195) kann mit der Restabschätzung $\omega_n = \Delta s_{n-1}$ kombiniert werden, wodurch die Δ^2 -Methode von Aitken reproduziert wird [368, Gln. (5.1-4), (5.1-6)]. Mit der alternativen Wahl $\omega_n = (n + \beta)\Delta s_{n-1}$ in Gl. (3.195) leitete Weniger [370] verschiedene iterative Folgentransformationen der gemeinsamen Struktur

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_0^{(n)} &= s_n , \\ \mathcal{Z}_{k+1}^{(n)} &= \mathcal{Z}_k^{(n+1)} - \frac{f_k^{(n)}(\eta)[\Delta \mathcal{Z}_k^{(n+1)}][\Delta \mathcal{Z}_k^{(n)}]}{f_k^{(n+1)}(\eta)[\Delta \mathcal{Z}_k^{(n+1)}] - f_k^{(n)}(\eta)[\Delta \mathcal{Z}_k^{(n)}} \end{aligned} \quad (3.197)$$

ab, wobei $\eta > 0$ ein Parameter ist. Genauso kann man von der Transformation (3.13) ausgehen. Dann erhalten wir etwas andere Algorithmen der Struktur

$$\begin{aligned} Z_0^{(n)} &= s_n , \\ Z_{k+1}^{(n)} &= Z_k^{(n)} - \frac{f_k^{(n)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n)}][\Delta Z_k^{(n)}]}{f_k^{(n+1)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n+1)}] - f_k^{(n)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n)}} . \end{aligned} \quad (3.198)$$

Diese kann man auch als

$$\begin{aligned} Z_0^{(n)} &= s_n , \quad \Omega_0^{(n)} = f_0^{(n)}(\eta)[\Delta s_n] , \\ Z_{k+1}^{(n)} &= Z_k^{(n)} - \frac{\Omega_k^{(n)}}{\Delta \Omega_k^{(n)}} \Delta Z_k^{(n)} , \\ \Omega_{k+1}^{(n)} &= f_{k+1}^{(n)}(\eta)[\Delta Z_{k+1}^{(n)}] \end{aligned} \quad (3.199)$$

schreiben. Wie im Falle des iterierten Aitken-Verfahrens kann man dies zu Definition (3.24) der \mathcal{J} -Transformation vergleichen. Man erkennt dann, daß diese leicht modifizierten Transformationen $Z_k^{(n)}$ der Wahl

$$\delta_n^{(k)} = - \frac{[f_{k+1}^{(n)}(\eta)\Delta Z_{k+1}^{(n)}] \{f_k^{(n+1)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n+1)}] - f_k^{(n)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n)}]\}}{f_k^{(n+1)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n+1)}] f_k^{(n)}(\eta)[\Delta Z_k^{(n)}]} \quad (3.200)$$

in der \mathcal{J} -Transformation entsprechen, wenn man die Identifizierungen $f_0^{(n)}(\eta)[\Delta s_n] = \omega_n$, $\Omega_k^{(n)} = \omega_n^{(k)}$ und $Z_k^{(n)} = s_n^{(k)}$ vornimmt. Demnach kann man Ausdrücke für den Kern angeben, die allerdings — wie beim iterierten Aitken-Verfahren — von den Transformaten $Z_k^{(n)}$ selbst abhängen.

Wir zeigen, daß das Overholt-Verfahren, Gl. (2.60) ein Spezialfall der \mathcal{J} -Transformation ist. Setzt man

$$\delta_n^{(k)} = -\frac{(\Delta s_{n+k+1})^{k+2} \Delta [(\Delta s_{n+k})^{k+1}]}{(\Delta s_{n+k})^{k+1} (\Delta s_{n+k+1})^{k+1}} = -\frac{(\Delta s_{n+k+1}) \Delta [(\Delta s_{n+k})^{k+1}]}{(\Delta s_{n+k})^{k+1}} \quad (3.201)$$

so kann man (2.60) umschreiben mit dem Resultat

$$V_0^{(n)} = s_n, \quad \omega_n^{(0)} = \Delta s_n, \quad (3.202a)$$

$$V_{k+1}^{(n)} = V_k^{(n)} - \frac{\omega_n^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}} \Delta V_k^{(n)} \quad (3.202b)$$

$$\omega_n^{(k+1)} = -\frac{\omega_n^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)}}{\Delta \omega_n^{(k)}} \delta_n^{(k)} = (\Delta s_{n+k+1})^{k+2}. \quad (3.202c)$$

Demnach ist das Overholt-Verfahren tatsächlich ein Spezialfall der \mathcal{J} -Transformation, wenn man (3.201) verlangt und $\omega_n = \Delta s_n$ verwendet.

Folglich gelten beispielsweise die Determinantendarstellungen, die oben für die \mathcal{J} -Transformation abgeleitet wurden, auch entsprechend für das Overholt-Verfahren. Man kann beispielsweise

$$V_2^{(n)} = \begin{vmatrix} \frac{s_n}{\Delta s_n} & \frac{s_{n+1}}{\Delta s_{n+1}} & \frac{s_{n+2}}{\Delta s_{n+2}} \\ 1 & 1 & 1 \\ \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} & \sum_{j=0}^n \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} & \sum_{j=0}^{n+1} \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} \\ \frac{1}{\Delta s_n} & \frac{1}{\Delta s_{n+1}} & \frac{1}{\Delta s_{n+2}} \\ 1 & 1 & 1 \\ \sum_{j=0}^{n-1} \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} & \sum_{j=0}^n \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} & \sum_{j=0}^{n+1} \frac{(\Delta s_{j+1})(\Delta^2 s_j)}{\Delta s_j} \end{vmatrix} \quad (3.203)$$

schreiben.

Verwendet man Gl. (3.201) und $\omega_n = \Delta s_n$ in Verbindung mit Satz 3.11, so erhält man Familien von Folgen, für die das Overholt-Verfahren exakt ist. Beispielsweise ist die V_2 -Transformation exakt für Folgen der Form

$$s_n = s + \Delta s_n \left(c_0 + c_1 \sum_{n_1=0}^{n-1} \frac{(\Delta s_{n_1+1})(\Delta^2 s_{n_1})}{(\Delta s_{n_1})} \right). \quad (3.204)$$

Dies ist eine nichtlineare Familie, die von zwei Parametern abhängt.

Wir bemerken, daß man modifizierte \mathcal{J} -Transformationen entwickeln kann, die auf der hierarchisch konsistenten Iteration anderer einfacher Transformationen anstelle von (3.13) beruhen, wie zum Beispiel auf $\rho_2^{(n)}$ [400] oder auf Gl. (3.195).

Die Methode der hierarchischen Konsistenz liefert einen neuen, relativ allgemeinen Zugang zur Konstruktion und effizienten Benutzung von iterativen Folgentransformationen. Die Hoffnung ist, daß dieses Konzept — ähnlich wie das der perfekten Fehlerschätzung [54] — weitere zusätzliche Einsichten hinsichtlich Konvergenzbeschleunigung, Extrapolation und Summation liefern wird.

3.3.8 Numerische Tests

Wir stellen erste numerische Resultate der \mathcal{J} -Transformation vor. Die Rechnungen wurden in FORTRAN QUADRUPLE PRECISION durchgeführt, was auf dem verwendeten Rechner (einer SUN-Workstation) etwa 32 Dezimalstellen entspricht, und zur Abschätzung der numerischen Stabilität in DOUBLE PRECISION (etwa 15 Dezimalstellen) wiederholt. Im folgenden wird als Stellenzahl der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlerbetrages verwendet.

Wenn nicht anders angegeben, wird jeweils die höchstmögliche Iterationsstufe benutzt. Das heißt, daß Folgentransformationen der Form

$$s'_n = \mathcal{J}_0^{(n)}(\{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) \quad (3.205)$$

in den folgenden Tabellen verwendet werden. Wir erinnern an die Abhängigkeiten in Gl. (3.25). Um also das n -te Element der transformierten Folgen zu berechnen, werden die Folgeelemente $\{s_\nu\}_{\nu=0}^n$ benutzt. Für $\omega_n = \Delta s_n$, also für die \tilde{t} -Varianten, wird zusätzlich s_{n+1} benötigt.

Spaltenbezeichner der Form $\beta_k = f(k)$ in den Tabellen bedeuten, daß die \mathcal{J} -Transformation mit

$$r_n^{(k)} = 1/(n + f(k)), \quad \delta_n^{(k)} = -1/(n + f(k))_2 \quad (3.206)$$

verwendet wurden. Wenn $f(k)$ linear in k ist, bedeutet das, daß eine Variante der ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation benutzt worden ist. In den meisten anderen Fällen wurden die \mathcal{T} -, $\tilde{\mathcal{T}}$ - und \mathcal{U} -Transformationen verwendet, die in Gln. (3.26), (3.27) und (3.28) definiert sind. In einigen Fällen wurden lineare Varianten der \mathcal{J} -Transformation benutzt, bei denen die Restabschätzungen ω_n nicht von den s_n abhängen. Aber auch in diesen Fällen werden die $\delta_n^{(k)}$ normalerweise wie in Gl. (3.206) gewählt.

In den Tabellen 3.1 — 3.3 wird die \mathcal{J} -Transformation an einigen Beispielen getestet, die von Brezinski und Redivo Zaglia [59, S. 273-275] als Testfälle herangezogen wurden. Ein genauer Vergleich mit den Resultaten dieser Autoren ist deshalb etwas schwierig, weil nicht vollständig klar ist, mit welcher Zahl von Dezimalstellen in ihren Programmen ihre Resultate berechnet wurden. Zum Zwecke der Diskussion nehmen wir hier an, daß man ihre Daten direkt zu unseren Daten vergleichen kann, die mit etwa 32 Dezimalstellen

Tabelle 3.1: Beschleunigung der Folge $s_{n-1} = (\cos(x_n) + a \sin(x_n))^{1/x_n} \cdot \exp(-a)$ für $a = 1$, $x_n = 0.8^n$

n	s_n	A	B	C
0	0.56727	0.5672720550613	0.5672720550613	0.5672720550613
2	0.67232	0.5603756979875	0.5794079651031	0.9346738122750
4	0.76045	-3.9133118579674	0.5200219200969	0.9934529112438
6	0.83070	0.9741409601610	1.1225200986264	0.9996475153695
8	0.88371	0.9992780180258	1.0030337856181	0.9999906939002
10	0.92185	1.0009399107924	1.0007212883640	0.9999998864939
12	0.94832	1.0001496110197	1.0000244503126	0.9999999993860
14	0.96620	0.9999863330110	0.9999777232278	0.9999999999986
16	0.97806	0.9999925816547	0.9999958948632	1.0000000000000
18	0.98583	0.9999994267593	1.0000002197867	1.0000000000000
20	0.99087	1.0000001945383	1.0000001889768	1.0000000000000
22	0.99414	1.0000000523404	1.0000000215900	1.0000000000000
24	0.99624	1.0000000007212	0.9999999960285	1.0000000000000
26	0.99759	0.9999999979774	0.9999999984311	1.0000000000000
28	0.99846	0.9999999996350	0.999999999071	1.0000000000000
30	0.99901	1.0000000000275	1.0000000000534	1.0000000000000
∞	1.00000	1.0000000000000	1.0000000000000	1.0000000000000

A: $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$, $\beta_k = 1$ B: $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$, $\beta_k = 2$ C: $\omega_n = x_n$, $\delta_n^{(k)} = x_{n+k}$

berechnet wurden. Falls Brezinski und Redivo Zaglia weniger Stellen benutzt haben, sind Einflüsse von Rundungsfehlern auf ihre Daten sehr wahrscheinlich.

Die Einträge in den Tabellen 3.1 - 3.3 in Spalten mit Bezeichnern $\beta_k = 1$ entsprechen ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$, die mit $\beta_k = 2$ entsprechen ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 2, \{s_n\})$. Diese Transformationen sind in Gl. (3.32) definiert. In den Tabellen 3.1 und 3.2 werden Folgen der Form

$$s_{n-1} = (\cos(x_n) + a \sin(x_n))^{1/x_n} \cdot \exp(-a), \quad n \in \mathbb{N}, a \in \mathbb{R} \quad (3.207)$$

betrachtet. Diese konvergieren gegen Eins, wenn die Hilfsfolge $\{x_n\}$ gegen Null konvergiert. Tatsächlich gilt $s_{n-1} - 1 = O(x_n)$ und

$$\frac{s_{n+1} - 1}{s_n - 1} = O(x_{n+2}/x_{n+1}) \quad (3.208)$$

für große n . In Tabelle 3.1 wird die Hilfsfolge $x_n = (0.8)^n$ behandelt, in Tabelle 3.2 dagegen

$x_n = 1/n$. Folglich konvergieren die Eingabefolgen in Tabelle 3.1 linear und in Tabelle 3.2 logarithmisch.

Die letzte Spalte entspricht dem sonst nicht behandelten Fall, daß die $\delta_n^{(k)}$ nicht gemäß Gl. (3.206), sondern gemäß $\delta_n^{(k)} = x_{n+k} = (0.8)^{n+k}$ gewählt wurden. Da die \mathcal{J} -Transformation in den $r_n^{(k)}$ multiplikativ invariant ist laut Satz 3.4 und demnach n -unabhängige Faktoren von $r_n^{(k)}$ unerheblich sind, erhält man die gleichen Resultate auch für $\delta_n^{(k)} = (0.8)^n$. Wegen $\Delta q^n = q^n(q-1)$ ergeben sich die gleichen Resultate ebenfalls für $r_n^{(k)} = (0.8)^{n+k}$ oder für $r_n^{(k)} = (0.8)^n$, wenn man wiederum Satz 3.4 ausnützt. Ebenso schließt man im Falle von $\delta_n^{(k)} = x_{n+k+1} - x_n = (0.8)^n \cdot (0.8^{k+1} - 1)$, was gleichbedeutend ist mit $r_n^{(k)} = \sum_{j=0}^k x_{n+j} = 5x_n(1 - (0.8)^{k+1})$. Aufgrund von Satz 3.18 ist der Kern der Transformation $\mathcal{J}_n^{(k)}(\{s_n\}, \{x_n\}, 5x_n(1 - (0.8)^{k+1}))$ durch

$$s_{n-1} = s + x_n \sum_{j=0}^{k-1} d_j (x_n)^j, \quad n \in \mathbb{N} \quad (3.209)$$

gegeben mit beliebigen Konstanten d_j . Dies kann man auffassen als die ersten Terme einer Potenzreihe von s_{n-1} in der Variablen x_n . Dies erklärt die ziemlich rasche Konvergenz in der letzten Spalte von Tabelle 3.1. Die Konvergenz ist langsamer für die anderen beiden Varianten. Man sollte aber beachten, daß diese beiden Varianten nur etwas weniger erfolgreich sind als der ϵ -Algorithmus, der 10.56 Stellen für $n = 20$ liefert, und besser als Levins t -Transformation, die 7.4 Stellen für diesen Wert von n liefert [59, S. 275].

Für die gleiche Rechnung in DOUBLE PRECISION gehen Stellen verloren. Für $\beta_k = 1$ waren die besten Resultate 7-8 exakte Stellen für $n \geq 19$ und 6-8 Stellen für $n \geq 18$ im Falle $\beta_k = 2$. Für $n > 25$ verschlechterte sich die Genauigkeit wieder. Im Falle $\omega_n = x_n$ und $\delta_n^{(k)} = x_{n+k}$, stellten 11-12 Stellen das beste Resultat für $n \geq 14$ dar. Für größere n nahm die Stellenzahl langsam bis auf 9 Stellen für $n = 30$ ab.

In Tabelle 3.2 zeigt sich, daß diese beiden u -Varianten sogar noch effizienter sind für $x_n = 1/n$. Zu beachten ist, daß für kleinere n die Leistung der Variante mit $\beta_k = 1$ zwischen der des ρ - und der des Θ -Algorithmus anzusiedeln ist, die beide wesentlich besser als eine Reihe von anderen Algorithmen abschneiden [59, S. 275]. Für größere n sind die Resultate der \mathcal{J} -Transformation sogar besser als die des ρ - und des Θ -Algorithmus, die für $n = 18$ eine Stellenzahl von 13.47 bzw. 9.86 aufweisen. [59, S. 275].

In DOUBLE PRECISION waren die besten Resultate 10 Dezimalstellen für $n = 11$ im Falle $\beta_k = 1$ und 8 Dezimalstellen für $n = 13$ im Falle $\beta_k = 2$.

In Tabelle 3.3 wird die Folge

$$s_{n-1} = (1 + x/n)^n \cdot \exp(-x) \quad (3.210)$$

für $x = 1$ betrachtet. Ihr Grenzwert ist bekanntlich Eins. Dies ist eine logarithmisch konvergente Folge und es gilt $s_{n-1} - 1 = -x^2/(2n) + O(1/n^2) = O(1/n)$. Ähnlich wie in Tabelle 3.2 liegen die Leistungen der verschiedenen u -Varianten der \mathcal{J} -Transformation zwischen dem ρ - und dem Θ -Algorithmus [59, S. 274] für kleinere Werte von n . Für höhere Werte von n ist die Konvergenz recht betriedigend, vor allem für den Fall $\beta_k = 2$.

In DOUBLE PRECISION waren die besten Resultate 9 exakte Stellen für $n = 10$ und $\beta_k = 1$ sowie 8 exakte Stellen für $n = 11$ und $\beta_k = 2$.

Tabelle 3.2: Beschleunigung von $s_{n-1} = (\cos(1/n) + a \sin(1/n))^n \cdot \exp(-a)$ für $a = 1$ und $\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$ mit $s_{-1} = 1$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 2$
5	0.8600217428314	1.0135997425407	1.4600320669391
6	0.8772578620360	0.9985709291230	0.9501182818399
7	0.8907052061442	1.0001223125935	1.0108181080846
8	0.9014918397610	0.9999914737390	0.9983764638148
9	0.9103376107750	1.0000004971692	1.0002088434895
10	0.9177237957539	0.9999999745416	0.9999773398060
11	0.9239845055428	1.0000000009975	1.0000021168614
12	0.9293590040817	0.9999999999302	0.9999998275900
13	0.9340231658411	0.999999999942	1.0000000123818
14	0.9381091811057	0.999999999980	0.999999992083
15	0.9417183353028	0.999999999995	1.0000000000454
16	0.9449295472490	0.999999999999	0.999999999976
17	0.9478052233297	1.000000000000	1.000000000001
18	0.9503953635162	1.000000000000	1.000000000000
∞	1.000000000000	1.000000000000	1.000000000000

Tabelle 3.3: Beschleunigung der Folge $s_{n-1} = (1 + x/n)^n \cdot \exp(-x)$ für $\omega_n = (n + 1)\Delta s_{n-1}$ mit $s_{-1} = 1$ und $x = 1$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 2$
0	0.7357588823429	0.7357588823429	0.7357588823429
1	0.8277287426357	0.9196986029286	0.9196986029286
2	0.8720105272212	1.0387184221311	1.1123973578279
3	0.8981431669225	0.9934942544930	0.9654414371834
4	0.9154017710557	1.0010075919708	1.0136591673145
5	0.9276545004797	0.9998983797339	0.9967609170400
6	0.9368048854906	1.0000093659781	1.0006435304738
7	0.9438993731584	0.9999995978043	0.9998988714306
8	0.9495611399413	1.0000000623405	1.0000130965297
9	0.9541845267642	1.0000000061521	0.9999985821397
10	0.9580312771961	1.0000000017113	1.0000001302724
11	0.9612819623291	1.0000000003795	0.9999999897128
12	0.9640651901688	1.0000000000880	1.0000000007052
13	0.9664750464046	1.0000000000205	0.999999999576
14	0.9685819513499	1.0000000000048	1.000000000022
15	0.9704396614614	1.0000000000011	0.999999999999
16	0.9720899236857	1.0000000000003	1.000000000000
17	0.9735656521671	1.0000000000001	1.000000000000
18	0.9748931471696	1.0000000000000	1.000000000000
∞	1.0000000000000	1.0000000000000	1.0000000000000

Tabelle 3.4: Beschleunigung der Reihe $\zeta(2)$ unter Verwendung von $\omega_n = (n + 1)\Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 2$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 2 + k$
0	1.0000	1.00000000000000	1.00000000000000	1.00000000000000	1.00000000000000
1	1.2500	1.50000000000000	1.50000000000000	1.50000000000000	1.50000000000000
2	1.3611	1.62500000000000	1.66666666666667	1.62500000000000	1.66666666666667
3	1.4236	1.6428571428571	1.64444444444444	1.64583333333333	1.64141414141414
4	1.4636	1.6447368421053	1.6448948948949	1.6448948948949	1.6456056466302
5	1.4914	1.6449152542373	1.6449307397583	1.6449358283971	1.6447858317612
6	1.5118	1.6449322143318	1.6449337653464	1.6449339851725	1.6449706252376
7	1.5274	1.6449338790187	1.6449340381402	1.6449340707114	1.6449242762514
8	1.5398	1.6449340473956	1.6449340640174	1.6449340666632	1.6449368570545
9	1.5498	1.6449340648035	1.6449340665620	1.6449340668572	1.6449332323647
10	1.5580	1.6449340666310	1.6449340668188	1.6449340668478	1.6449343262121
11	1.5650	1.6449340668250	1.6449340668452	1.6449340668482	1.6449339836640
12	1.5709	1.6449340668457	1.6449340668479	1.6449340668482	1.6449340942338
13	1.5760	1.6449340668480	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340576310
14	1.5804	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340700098
15	1.5843	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340657459
∞	1.6449	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340668482	1.6449340668482

In Tabelle 3.4 transformieren wir die Folge der Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n (j+1)^{-2} \quad (3.211)$$

der unendlichen Reihe

$$\zeta(2) = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)^{-2} = \pi^2/6. \quad (3.212)$$

Diese Folge ist logarithmisch konvergent. Die Reste $s_n - \zeta(2)$ fallen wie n^{-1} für große n [368, S. 345]. Dies ist ein Spezialfall der Reihe

$$\zeta(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (j+1)^{-z}, \quad (3.213)$$

die die ζ -Funktion von Riemann definiert, die häufig als typisches Beispiel logarithmischer Konvergenz herangezogen wird. Wenn $\Re(z)$ nur wenig größer als Eins ist, ist die Reihe sehr langsam konvergent (vgl. z.B. [29, S. 379]). Tatsächlich sind die Reste von der Ordnung n^{1-z} für große n .

Die Einträge in Tabelle 3.4 entsprechen der Anwendung der ${}_p\mathbf{U}$ -Transformation, die in Gl. (3.32) definiert ist. Einträge für $\beta_k = 1$ entsprechen ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$, solche für $\beta_k = 2$ entsprechen ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 2, \{s_n\})$, solche für $\beta_k = 1 + k$ entsprechen ${}_2\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$ und solche für $\beta_k = 2 + k$ entsprechen ${}_2\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 2, \{s_n\})$.

Sieger in dieser Tabelle ist die Transformation ${}_2\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$.

Bei gleicher Rechnung in DOUBLE PRECISION machen sich Stellenverluste bemerkbar. Dies ist im Falle logarithmischer Konvergenz auch zu erwarten. Für $\beta_k = 1$ erhielten wir 11 exakte Stellen für $n = 11$ und 12 Stellen für $\beta_k = 2$. Die entsprechenden Resultate für $\beta_k = 1 + k$ waren 11 Stellen für $n = 9$ und 8 Stellen für $\beta_k = 2 + k$. Für größere Werte von n nahm die Genauigkeit wieder ab. Bemerkenswert sei auch, daß die Werte in DOUBLE PRECISION schwach davon abhängen, welcher Algorithmus für die Berechnung der \mathcal{J} -Transformation verwendet wurde, ob also Gl. (3.24) oder ob Gl. (3.50) zugrundegelegt wurde.

Vergleich mit Literaturergebnissen [368, Tab. 14-1, S. 351], [370, Tab. 1] zeigt, daß für die Reihe (3.212) die transformierte Folge ${}_2\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$ schneller konvergiert als die iterierte ρ_2 -Transformation, die — gemäß [368, S. 351] — zusammen mit der Standardform des ρ -Algorithmus von Wynn [400] als das beste Beschleunigungsverfahren für die Reihe (3.212) gilt. Allerdings sollte man bemerken, daß ${}_2\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$ etwas anfälliger für Rundungsfehler zu sein scheint als die iterierte ρ_2 -Transformation, da letztere immerhin 13 Dezimalstellen für $n = 12$ in DOUBLE PRECISION exakt berechnen konnte [370].

Wenn der dominierende Fehlerterm einer Reihe bekannt ist, kann man schnellere Konvergenz erzielen, indem man eine bekannte Reihe mit dem gleichen Verhalten der Reste termweise abzieht und den Grenzwert dieser Reihe addiert (vgl. z.B. [105, S. 152f]). Im Falle der Reihe für $\zeta(2)$ kann man dazu die Reihe

$$\sum_{n=1}^{\infty} 4/(4n^2 - 1) = 2 \quad (3.214)$$

verwenden und erhält eine schneller konvergente Reihe

$$\pi^2/6 = 2 - \sum_{n=1}^{\infty} 1/[n^2(4n^2 - 1)]. \quad (3.215)$$

Der Fehler der Partialsummen

$$\tilde{s}_n = 2 - \sum_{m=1}^n 1/[m^2(4m^2 - 1)] \quad (3.216)$$

ist dann $O(n^{-3})$.

Diese Technik hat häufig auch einen positiven Einfluß auf Rundungsfehler [105]. Für das Beispiel der $\zeta(2)$ -Reihe erhält man zum Beispiel bei Rechnung in DOUBLE PRECISION

$$\begin{array}{lll} {}_1\mathbf{U}_0^{(12)}(1, 1, \{s_n\}) = 1.6449340668401, & {}_1\mathbf{U}_0^{(12)}(1, 2, \{s_n\}) & = 1.6449340668458, \\ {}_2\mathbf{U}_0^{(9)}(1, 1, \{s_n\}) = 1.6449340668613, & {}_2\mathbf{U}_0^{(14)}(1, 2, \{s_n\}) & = 1.6449340738669, \\ {}_1\mathbf{U}_0^{(11)}(1, 1, \{\tilde{s}_n\}) = 1.6449340668485, & {}_1\mathbf{U}_0^{(12)}(1, 2, \{\tilde{s}_n\}) & = 1.6449340668481, \\ {}_2\mathbf{U}_0^{(14)}(1, 1, \{\tilde{s}_n\}) = 1.6449340664834, & {}_2\mathbf{U}_0^{(16)}(1, 2, \{\tilde{s}_n\}) & = 1.6449340654318. \end{array}$$

Es ist also möglich, unter günstigen Umständen ein bis zwei Stellen an Genauigkeit zu gewinnen. Die Stabilität ist auch erhöht. In DOUBLE PRECISION ergeben sich folgende Resultate: Für $n = 20$ und Anwendung der \mathcal{J} -Transformation auf s_n findet man nur fünfstellige Genauigkeit für $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$, und siebenstellige Genauigkeit für $\beta_k = 1$ und $\beta_k = 2$. Anwendung auf \tilde{s}_n ergibt für den gleichen Wert von n siebenstellige Genauigkeit für $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$, zehnstellige Genauigkeit für $\beta_k = 1$, und neunstellige Genauigkeit für $\beta_k = 2$.

Um den Vergleich mit Literaturergebnissen zu erleichtern, bei denen diese Technik normalerweise nicht verwendet wird, wird sie im folgenden nicht angewandt werden.

In Tabelle 3.5 wird die \mathcal{U} -Transformation auf die Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n \frac{(2j-1)!!}{(2j)!!} \frac{1}{4j+1} \quad (3.217)$$

der logarithmisch konvergenten Reihe für die Lemniskatenkonstante A [234, S. 358f],[356, S. 14]

$$A = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(2j-1)!!}{(2j)!!} \frac{1}{4j+1} = \frac{[\Gamma(1/4)]^2}{4(2\pi)^{1/2}} \quad (3.218)$$

angewandt. Die Terme fallen für große j wie $1/(j+1)^{3/2}$. Folglich verhalten sich die Fehler $(s_n - A)$ der Partialsummen wie $n^{-1/2}$ für $n \rightarrow \infty$ [368, S. 347].

Man erkennt, daß die Wahl $\beta_k = 2$ der Wahl $\beta_k = 1$ für kleinere n leicht unterlegen ist, für größere n aber vorteilhaft ist. Die Wahl $\beta_k = 1$ entspricht der Transformation ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$, die Wahl $\beta_k = 2$ der Transformation ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 2, \{s_n\})$. Vergleich mit Literaturdaten [368, Tab. 14-2, S. 352, Tab. 14-3, S. 354] zeigt, daß die Transformation

Tabelle 3.5: Beschleunigung der Reihe für die Lemniskatenkonstante A mit

$$\omega_n = (n+1)\Delta s_{n-1}$$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 2$
0	1.00000000000000	1.00000000000000	1.00000000000000
1	1.10000000000000	1.12500000000000	1.12500000000000
2	1.14166666666667	1.28000000000000	1.38333333333333
3	1.1657051282051	1.3142857142857	1.31666666666667
4	1.1817896870287	1.3111307832083	1.3035188216039
5	1.1935084370287	1.3110313621470	1.3129629487244
6	1.2025318745287	1.3110287090436	1.3107614635193
7	1.2097550695718	1.3110287414708	1.3110539269469
8	1.2157059973061	1.3110287696902	1.3110270291805
9	1.2207187157130	1.3110287757933	1.3110288714735
10	1.2250162047862	1.3110287769095	1.3110287730285
11	1.2287537180105	1.3110287771048	1.3110287772911
12	1.2320431110268	1.3110287771388	1.3110287771413
13	1.2349672811610	1.3110287771448	1.3110287771461
14	1.2375891404731	1.3110287771458	1.3110287771460
15	1.2399574101139	1.3110287771460	1.3110287771461
16	1.2421104860230	1.3110287771461	1.3110287771461
17	1.2440790912340	1.3110287771461	1.3110287771461
18	1.2458881405432	1.3110287771461	1.3110287771461
19	1.2475580797723	1.3110287771461	1.3110287771461
20	1.2491058660392	1.3110287771461	1.3110287771461
∞	1.3110287771461	1.3110287771461	1.3110287771461

${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 1, \{s_n\})$ leichte Vorteile gegenüber der u -Transformation von Levin hat, die dort am besten abschnitt.

In DOUBLE PRECISION erhielt man 11 Dezimalstellen für ${}_1\mathbf{U}_0^{(11)}(1, 1, \{s_n\})$ und ebenfalls für ${}_1\mathbf{U}_0^{(12)}(1, 2, \{s_n\})$. Verwendung des Algorithmus (3.24) für ${}_1\mathbf{U}_0^{(n)}(1, 2, \{s_n\})$ lieferte etwas genauere Ergebnisse als der Algorithmus (3.50). Für größere Werte von n nahm die Genauigkeit wieder ab. Diese Ergebnisse sind sehr ähnlich zu denen der u -Transformation von Levin. [368, S. 352]

In Tabellen 3.6 - 3.9 wird ein besonders schwieriges Beispiel logarithmischer Konvergenz behandelt. Es handelt sich um die sogenannte $1/z$ -Entwicklung (vgl. z.B. [158, Gl.

(3.2-32), S. 30))

$$1/z = \sum_{n=0}^{\infty} \widehat{k}_{n-1/2}(z)/[2^n n!] \quad (3.219)$$

für $z > 0$. Es treten hier reduzierte Bessel-Funktionen [334]

$$\widehat{k}_{\nu}(z) = (2/\pi)^{1/2} z^{\nu} K_{\nu}(z) \quad (3.220)$$

auf, die über die modifizierten Bessel-Funktionen zweiter Art $K_{\nu}(z)$ definiert sind [234, S. 66]. Eine gründliche Diskussion jüngerer Datums der reduzierten Bessel-Funktionen findet man bei Homeier [158, Abschn. 3].

Die $1/z$ -Entwicklung ist eine langsam konvergente Reihe. Ihre Terme fallen für große n wie $1/(n+1)^{3/2}$. Folglich verhalten sich die Reste der Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n \widehat{k}_{j-1/2}(z)/[2^j j!], \quad (3.221)$$

also die Größen $(s_n - 1/z)$, wie $n^{-1/2}$ im Grenzwert $n \rightarrow \infty$ [368, S. 349]. Demnach benötigt etwa 1 000 000 Terme, um durch Aufsummieren der Reihe für $z = 1$ dreistellige Genauigkeit zu erzielen.

Die Abschätzung der Terme und damit der Reste basiert auf der Beziehung [368, Gl. (14.3-18)]

$$\widehat{k}_{n+1/2}(z) = 2^n (1/2)_n [1 + O(n^{-1})] \quad (3.222)$$

für große $n \gg z$. Es folgt

$$\sum_{j=n+1}^{\infty} \widehat{k}_{j-1/2}(z)/[2^j j!] \sim \sum_{j=n+1}^{\infty} \frac{2^{j-1} (1/2)_{j-1}}{2^j j!} = \frac{1}{2} \sum_{j=n}^{\infty} \frac{(1/2)_j}{(j+1)!} = \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} = O(n^{-1/2}) \quad (3.223)$$

für große n .

Hierbei wurde Gebrauch gemacht von der Gleichung [368, Gl. (14.3-21)]

$$\sum_{j=n}^{\infty} \frac{(2j-1)!!}{(2j+2)!!} = \frac{(1/2)_n}{(n)!} = \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}. \quad (3.224)$$

Man vergleiche auch die Diskussion in [368, Abschn. 14].

Es gibt andere Reihen mit diesem Konvergenzverhalten, zum Beispiel $\zeta(3/2)$ oder die Reihe (3.218) für die Lemniskatenkonstante A . Es bleibt aber festzuhalten, daß die $1/z$ -Entwicklung weit schwieriger zu extrapolieren ist als diese Reihen. Der Grund ist, daß das asymptotische Verhalten der Terme für große n sich erst sehr spät durchsetzt, wenn z relativ groß ist. Weil also die $1/z$ -Entwicklung schwieriger zu extrapolieren ist, ist sie ein anspruchsvollerer Testfall für die Fähigkeit einer Folgentransformation, logarithmische Konvergenz zu beschleunigen, als $\zeta(2)$ oder die Reihe (3.218).

Gemäß Ref. [370] ist eine der beiden besten Folgentransformationen für die $1/z$ -Entwicklung das Osada-Verfahren (2.45). Die andere sehr erfolgreiche Transformation ist der

Tabelle 3.6: Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 1/2$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(1/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$

n	ω_n			
	s_n	$(n+1)\Delta s_{n-1}$	$(n+1)^{-1/2}$	$(2n-1)!!/(2n)!!$
0	1.2130613194253	1.2130613194253	1.2130613194253	1.2130613194253
1	1.5163266492816	1.8195919791379	1.9401611146995	1.7289768951964
2	1.6300511479777	1.7698763512926	2.2516999724789	2.1032155536679
3	1.6900724111784	1.8954331426658	1.9831462870436	1.9960389020641
4	1.7281780157763	2.0088384473858	1.9989772237121	1.9990837253199
5	1.7550395054422	2.0085183347641	1.9997458168750	1.9997375448177
6	1.7752650093680	1.9958525344721	2.0001097526883	2.0000873237203
7	1.7911964491931	1.9996291143085	1.999979362241	2.0000004735389
8	1.8041633171580	2.0002789359885	1.9999974205459	1.9999976082798
9	1.8149828698370	1.9999599454208	2.0000002454748	2.0000001431715
10	1.8241884943835	1.9999881696571	2.0000000603100	2.0000000486355
11	1.8321449539650	2.0000024401806	1.9999999944846	1.9999999931683
12	1.8391112148225	1.9999999024935	2.0000000002443	1.9999999994553
13	1.8452768640345	1.9999998776094	2.0000000003953	2.0000000001831
14	1.8507843002336	2.0000000055899	2.0000000000432	1.9999999999963
15	1.8557428278275	1.9999999998206	2.0000000000093	1.9999999999969
16	1.8602379276877	1.9999999991435	2.0000000000036	2.0000000000003
17	1.8643375404571	1.999999999243	2.0000000000008	2.0000000000000
18	1.8680964369459	1.999999999851	2.0000000000002	2.0000000000000
19	1.8715593276470	1.999999999927	2.0000000000001	2.0000000000000
20	1.8747631197850	1.999999999985	2.0000000000000	2.0000000000000
21	1.8777385849386	1.999999999997	2.0000000000000	2.0000000000000
22	1.8805116108815	1.999999999999	2.0000000000000	2.0000000000000
23	1.8831041548293	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
24	1.8855349787552	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
25	1.8878202233022	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
∞	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000

Tabelle 3.7: Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 1/2$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(3/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$

n	ω_n			
	s_n	$(n+1)\Delta s_{n-1}$	$(n+1)^{-1/2}$	$(2n-1)!!/(2n)!!$
0	1.2130613194253	1.2130613194253	1.2130613194253	1.2130613194253
1	1.5163266492816	1.8195919791379	1.9401611146995	1.7289768951964
2	1.6300511479777	1.7597931817014	2.8974678654563	2.7208531052540
3	1.6900724111784	2.0198236550399	1.7758521160122	1.8186273767203
4	1.7281780157763	2.1683687738779	2.1108031095670	2.0606690789706
5	1.7550395054422	1.9610532997664	1.9806399987496	1.9904649230342
6	1.7752650093680	1.9903554653374	2.0031206520178	2.0015172801553
7	1.7911964491931	2.0089450705729	1.9994720065417	1.9996742296047
8	1.8041633171580	1.9984972367557	2.0000894663050	2.0000621495258
9	1.8149828698370	1.9996635928059	1.9999912318622	1.9999946508880
10	1.8241884943835	2.0001865992541	1.9999997665848	1.9999995446020
11	1.8321449539650	1.9999776968687	2.0000001402618	2.0000001276295
12	1.8391112148225	1.9999953883548	2.0000000021400	2.0000000047072
13	1.8452768640345	2.0000018237998	1.9999999956585	1.9999999959358
14	1.8507843002336	1.9999998585038	2.0000000003989	2.0000000003117
15	1.8557428278275	1.9999999600523	2.0000000000581	2.0000000000607
16	1.8602379276877	2.0000000106331	1.999999999858	1.999999999872
17	1.8643375404571	1.999999996152	2.0000000000002	2.0000000000000
18	1.8680964369459	1.999999997621	2.0000000000003	2.0000000000002
19	1.8715593276470	2.0000000000424	2.0000000000000	2.0000000000000
20	1.8747631197850	2.0000000000002	2.0000000000000	2.0000000000000
21	1.8777385849386	1.9999999999990	2.0000000000000	2.0000000000000
22	1.8805116108815	2.0000000000001	2.0000000000000	2.0000000000000
23	1.8831041548293	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
24	1.8855349787552	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
25	1.8878202233022	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000
∞	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000	2.0000000000000

BDG-Algorithmus (2.44). Das Osada-Verfahren und der BDG-Algorithmus hängen jeweils von einem Parameter $\theta = -\alpha$ ab, den man explizit vorgeben muß. Für Folgen der Form

$$s_n = s + \sum_{j=0}^{\infty} c_j / (n+1)^{\alpha+j} \quad (3.225)$$

kann man mit diesen Algorithmen den Fehler auf $O(n^{-\alpha-2k})$ für große n reduzieren. Vergleiche auch Abschnitt 2.2.6.

Im Falle der $1/z$ -Entwicklung muß man aufgrund von Gl. (3.223) den Wert $\alpha = 1/2$ wählen. Ein vernünftige Restabschätzung ist demnach $\omega_n = (n+1)^{-1/2}$. Gleichung (3.223) motiviert auch die alternative Wahl $\omega_n = (2n-1)!!/(2n)!!$. Diese Restabschätzung ist ebenfalls $O(n^{-1/2})$ für große n . Verwendet man eine dieser Restabschätzungen und sind die $\delta_n^{(k)}$ unabhängig von n , so ist die \mathcal{J} -Transformation eine lineare Funktion der Partialsummen.

Diese beiden linearen Varianten der \mathcal{J} -Transformation werden später in einem anderen Zusammenhang noch einmal auftauchen.

In den Tabellen 3.6 und 3.7 wird der Fall $z = 1/2$ behandelt. In den Tabellen 3.8 und 3.9 wählen wir den etwas schwierigeren Fall $z = 4/5$. In allen Tabellen werden die nichtlineare u -Variante ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(\beta, \{s_n\}, \{(n+1)\Delta s_{n-1}\})$ und die beiden linearen Transformationen ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(\beta, \{s_n\}, \{(n+1)^{-1/2}\})$ und ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(\beta, \{s_n\}, \{(2n-1)!!/(2n)!!\})$ miteinander verglichen. Die ${}_p\mathbf{J}$ -Transformation ist in Gl. (3.29) definiert. Es werden jeweils die beiden Werte $\beta = 1/2$ und $\beta = 3/2$ verwendet, um so die Abhängigkeit von β zu untersuchen.

In den Tabellen 3.6 - 3.9 schneiden die linearen Transformationen besser ab als die nichtlineare u -Variante. Die Wahl $\omega_n = (n+1)^{-1/2}$ ist etwas schlechter als die Wahl $\omega_n = (2n-1)!!/(2n)!!$. Für $z = 1/2$ sind die Resultate für $\beta = 3/2$ fast so gut wie die für $\beta = 1/2$. Für $z = 4/5$ sind sie schlechter.

In DOUBLE PRECISION erhält man als beste Resultate für die u -Variante 9 exakte Stellen für $n = 16$, $\beta = 1/2$, $z = 4/5$, 8 Stellen für $n = 17$, $\beta = 3/2$, $z = 4/5$, 10 Stellen für $n = 15$, $\beta = 1/2$, $z = 1/2$ sowie 8 Stellen für $n = 15$, $\beta = 3/2$, $z = 1/2$. Für die Variante mit $\omega_n = (n+1)^{-1/2}$ sind die entsprechenden Resultate 10 Stellen für $n = 14$, $\beta = 1/2$, $z = 4/5$, 9 Stellen für $n = 13$, $\beta = 3/2$, $z = 4/5$, 10 Stellen für $n = 12$, $\beta = 1/2$, $z = 1/2$ sowie 9 Stellen für $n = 12$, $\beta = 3/2$, $z = 1/2$. Für die Variante mit $\omega_n = (2n-1)!!/(2n)!!$ erhält man entsprechend 9 Stellen für $n = 13$, $\beta = 1/2$, $z = 4/5$, 9 Stellen für $n = 14$, $\beta = 3/2$, $z = 4/5$, 10 Stellen für $n = 13$, $\beta = 1/2$, $z = 1/2$ sowie 9 Stellen für $n = 12$, $\beta = 3/2$, $z = 1/2$. Für größere n verschlechterte sich jeweils die Genauigkeit wieder.

Die Resultate für $z = 1/2$ kann man direkt zu den Resultaten in [370, Tab. 3] vergleichen. Diese Daten zeigen, daß die Methode von Bjørstad, Dahlquist und Grosse [34] Osadas modifiziertem ρ -Algorithmus [268] für $n < 14$ leicht überlegen und für $n \geq 14$ leicht unterlegen ist. Die Einträge in der letzten Spalte von Tabelle 3.6, die unsere besten Resultate für $z = 1/2$ darstellen, sind fast so gut wie die Resultate für Osadas Algorithmus mit $\alpha = 1/2$. Beispielsweise ist der absolute Fehler dieser Methode $2.83 \cdot 10^{-8}$ für $n = 10$, und für $n = 15$ beträgt er $2 \cdot 10^{-13}$. Das Osada-Verfahren ist allerdings numerisch etwas stabiler.

Tabelle 3.8: Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(1/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$

n	ω_n			
	s_n	$(n+1)\Delta s_{n-1}$	$(n+1)^{-1/2}$	$(2n-1)!!/(2n)!!$
0	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465
1	0.7863256872051	1.6849836154396	-0.3059163945457	2.6080909407769
2	0.8874247041315	1.0441621062120	1.0295198442850	1.0907759474927
3	0.9439652654496	1.1290066775475	1.3664156931064	1.3168869927161
4	0.9806511031658	1.2344590561626	1.2388673953052	1.2444786078617
5	1.0067835140576	1.2675112037949	1.2494508319351	1.2493218391598
6	1.0265784800276	1.2497238969666	1.2500625453356	1.2500244011037
7	1.0422312196170	1.2476965477006	1.2500488138823	1.2500441133153
8	1.0550056275790	1.2501759545590	1.2499958173587	1.2499973122653
9	1.0656857514131	1.2501475513893	1.2499984240104	1.2499984765657
10	1.0747865667307	1.2499682133207	1.2500002099507	1.2500001534578
11	1.0826618965033	1.2499936918374	1.2500000455466	1.2500000421434
12	1.0895638413456	1.2500020835907	1.2499999926654	1.2499999931519
13	1.0956774851981	1.2500000290267	1.2499999994014	1.2499999991662
14	1.1011421634246	1.2499998954210	1.2500000003150	1.2500000002378
15	1.1060650318428	1.2500000061421	1.2500000000173	1.2500000000069
16	1.1105300244656	1.2500000024541	1.249999999964	1.2499999999936
17	1.1146039429560	1.2499999993682	1.250000000012	1.2500000000003
18	1.1183407028756	1.2499999999381	1.2500000000003	1.2500000000001
19	1.1217843613599	1.2500000000142	1.2500000000000	1.2500000000000
20	1.1249713188304	1.2499999999977	1.2500000000000	1.2500000000000
21	1.1279319483516	1.2499999999992	1.2500000000000	1.2500000000000
22	1.1306918204772	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
23	1.1332726371099	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
24	1.1356929526660	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
25	1.1379687375065	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
∞	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000

Tabelle 3.9: Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$ durch ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(3/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$

n	ω_n			
	s_n	$(n+1)\Delta s_{n-1}$	$(n+1)^{-1/2}$	$(2n-1)!!/(2n)!!$
0	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465
1	0.7863256872051	1.6849836154396	-0.3059163945457	2.6080909407769
2	0.8874247041315	0.9701420816167	0.7940766412801	0.9577796962313
3	0.9439652654496	1.2243836934260	-1.1522101700658	3.1025765473446
4	0.9806511031658	1.3766486583033	1.0194845663501	1.0956840719847
5	1.0067835140576	1.2606316137981	1.3505347495214	1.3043957020692
6	1.0265784800276	1.2248589296994	1.2352073615060	1.2419028868439
7	1.0422312196170	1.2541354238190	1.2518157890306	1.2509080637530
8	1.0550056275790	1.2527652442066	1.2497879615312	1.2498773382912
9	1.0656857514131	1.2489653420852	1.2500334820297	1.2500242428488
10	1.0747865667307	1.2499591776960	1.2499967357241	1.2499978469438
11	1.0826618965033	1.2500870799704	1.2499996928156	1.2499996351556
12	1.0895638413456	1.2499875058906	1.2500000919066	1.2500000804822
13	1.0956774851981	1.2499969916043	1.2500000068453	1.2500000081303
14	1.1011421634246	1.2500011069798	1.2499999962522	1.2499999965593
15	1.1060650318428	1.2499999809870	1.2500000000964	1.2500000000368
16	1.1105300244656	1.2499999550124	1.2500000001028	1.2500000000991
17	1.1146039429560	1.2500000067020	1.2499999999887	1.2499999999905
18	1.1183407028756	1.2500000008187	1.2499999999982	1.2499999999981
19	1.1217843613599	1.249999996639	1.2500000000004	1.2500000000004
20	1.1249713188304	1.2500000000137	1.2500000000000	1.2500000000000
21	1.1279319483516	1.2500000000089	1.2500000000000	1.2500000000000
22	1.1306918204772	1.2499999999985	1.2500000000000	1.2500000000000
23	1.1332726371099	1.2499999999999	1.2500000000000	1.2500000000000
24	1.1356929526660	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
25	1.1379687375065	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000
∞	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000	1.2500000000000

Für $z = 4/5$ sind unsere besten Resultate die in der letzten Spalte von Tabelle 3.8. Man kann sie direkt mit [368, Tab. 14-5, S. 358] vergleichen. Dabei stellt man fest, daß unsere besten Ergebnisse viel besser sind als die, die man mit Brezinskis θ -Algorithmus [47] und der iterierten θ_2 -Transformation [368, Abschn. 10.3] erhält. Alle Daten in Tabelle 3.8 kann man auch direkt mit [368, Tab. 14-6, S. 360] vergleichen. Dort wird die Levin-Transformation [222] in der Form

$$\mathcal{L}_n^{(0)}(1/2, s_0, \omega_0) = \frac{\sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \frac{(j+1/2)^{n-1} s_j}{(n+1/2)^{n-1} \omega_j}}{\sum_{j=0}^n (-1)^j \binom{n}{j} \frac{(j+1/2)^{n-1} 1}{(n+1/2)^{n-1} \omega_j}}, \quad n \in \mathbb{N}_0, \quad (3.226)$$

anstelle unserer Transformation ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(1/2, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ mit den gleichen Werten für ω_n benutzt. Der Vergleich zeigt für dieses Beispiel, daß in jedem Fall die ${}_1\mathbf{J}$ -Transformation der Levin-Transformation zum gleichen ω_n überlegen ist.

In Tabellen 3.10 - 3.13 wird die Euler-Reihe behandelt. Es handelt sich um eine divergente Stieltjes-Reihe der Form (A.43). Die Euler-Reihe ist die asymptotische Entwicklung

$$E(z) \sim {}_2F_0(1, 1; -z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n n! z^n, \quad z \rightarrow 0, \quad (3.227)$$

des Euler-Integrales

$$E(z) = \int_0^{\infty} \frac{\exp(-t)}{1+zt} dt. \quad (3.228)$$

Die Terme der Euler-Reihe sind im wesentlichen bestimmt durch die Momente $\mu_n = n!$ des positiven Maßes $d\psi(t) = \exp(-t) dt$. Demnach ist das Euler-Integral eine Stieltjes-Funktion. Es ist verwandt mit dem Exponentialintegral

$$E_1(z) = \int_z^{\infty} \frac{\exp(-t)}{t} dt \quad (3.229)$$

aufgrund der Gleichung [110, S. 144, Gl. (14)]

$$z \exp(z) E_1(z) = E(1/z). \quad (3.230)$$

Das Exponentialintegral $E_1(z)$ kann für $z > 0$ über das Unterprogramm S13AAF der NAG-Bibliothek berechnet werden. Ein exakter Wert für die summierte Reihe ist demnach verfügbar. Aus diesem Grund verwenden wir für die folgenden Tabellen die Euler-Reihe in der Variablen $1/z$, also die hypergeometrische Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ mit Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n (-1)^j j! z^{-j}. \quad (3.231)$$

Diese Reihe hat Konvergenzradius Null und divergiert rasch für alle $|z| < \infty$. Die Divergenz ist je schneller, je kleiner z ist. Die Summation dieser divergenten Reihe ist eindeutig aufgrund eines Theorems von Carleman [292, S. 39].

In den Tabellen 3.10 und 3.11 wird der Fall $z = 3$ behandelt. Verwendet werden die ${}_p\mathbf{T}$ -Transformation aus Gl. (3.30) und die ${}_p\tilde{\mathbf{T}}$ -Transformation aus Gl. (3.31). Verglichen werden ${}_1\mathbf{T}_0^{(n)}(2, \{s_n\})$ entsprechend zu $\beta_k = 2$ und ${}_2\mathbf{T}_0^{(n)}(\beta, \{s_n\})$ für $\beta = 1$ und $\beta = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$ in Tabelle 3.10 einerseits und ${}_1\tilde{\mathbf{T}}_0^{(n)}(2, \{s_n\})$ entsprechend zu $\beta_k = 2$, und ${}_2\tilde{\mathbf{T}}_0^{(n)}(\beta, \{s_n\})$ für $\beta = 1$ und $\beta = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$ in Tabelle 3.11 andererseits. Man sollte erwarten, daß die \tilde{t} -Varianten besser abschneiden. Es stellt sich jedoch heraus, daß die entsprechenden t -Varianten kleine Vorteile haben. Die ${}_1\mathbf{T}$ - und ${}_1\tilde{\mathbf{T}}$ -Transformations sind nicht so erfolgreich wie die t - und \tilde{t} -Varianten der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation. Letztere verhalten sich sehr ähnlich.

In DOUBLE PRECISION wichen höchsten die letzten beiden Stellen im Falle $\beta_k = 2$ beziehungsweise die letzte Stelle in den Fällen $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$ von den QUADRUPLE PRECISION Resultaten in den Tabellen 3.10 und 3.11 ab. Folglich sind numerische Instabilitäten im Falle dieser alternierenden Reihe unwichtig für ein großes Argument wie $z = 3$.

Die Daten in den Tabellen 3.10 und 3.11 kann man direkt mit Literaturergebnissen vergleichen [368, Tab. 13-1, S. 328, Tab. 13-2, S. 329]. Der Vergleich zeigt, daß sowohl die t - also auch die \tilde{t} -Varianten für $\beta_k = 2$ dem Verhalten der t -Transformation von Levin gleichen. Ebenso gleichen die Ergebnisse der t - und \tilde{t} -Varianten für $\beta_k = 1 + k$ und $\beta_k = 2 + k$ den Resultaten der \tilde{t} -Variante der Weniger-Transformation $\mathcal{S}_n^{(0)}$ aus Gl. (2.55). Dies ist ein bemerkenswerter Erfolg der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation, da die Weniger-Transformation für stark divergente Stieltjes-Reihen sehr effizient ist [376, 377, 378].

In den Tabellen 3.12 und 3.13 sind Resultate für den Fall $z = 1/2$ dargestellt. Verglichen werden die t -Varianten ${}_p\mathbf{T}_0^{(n)}(2, \{s_n\})$ aus Gl. (3.30) für $p = 1$ entsprechend zu $\beta_k = 2$, für $p = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 2 + k$ und für $p = 3$ entsprechend zu $\beta_k = 2 + 2k$ in Tabelle 3.12 einerseits und die \tilde{t} -Varianten ${}_p\tilde{\mathbf{T}}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ aus Gl. (3.31) für $p = 1$ entsprechend zu $\beta_k = 1$, für $p = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$ und für $p = 3$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + 2k$ in Tabelle 3.13 andererseits.

Man bemerke, daß die Wahl $\beta_k = \beta + 2k$, die der ${}_3\mathbf{J}$ -Transformation entspricht, gleichbedeutend ist mit der Verwendung entsprechender t - oder \tilde{t} -Varianten der Weniger-Transformation (2.55) aufgrund von Gl. (3.176) in Verbindung mit Satz 3.4. Ein Vergleich der Tabelle 3.13 mit [368, Tab. 13-3, S. 330] zeigt, daß man tatsächlich identische numerische Resultate erhält.

Wieder ist der Unterschied zwischen einander entsprechenden t - und \tilde{t} -Varianten nicht groß. Die Wahl der β_k ist wichtiger als dieser Unterschied, der einer Indexverschiebung von ω_n um Eins entspricht. Die Transformationen zu $\beta_k = 1$ und $\beta_k = 2$ zeigen ähnliche Resultate wie die \tilde{t} -Variante der Levin-Transformation [368, Tab. 13-3, S. 330]. Die Transformationen zu $\beta_k = 2 + (p - 1)k$ sind denen zu $\beta_k = 1 + (p - 1)k$ leicht überlegen.

In DOUBLE PRECISION traten einige Stellenverluste auf. Für $\beta_k = 2$ waren die besten Resultate 7 exakte Stellen für $n = 14$, 10 Dezimalstellen für $\beta_k = 2 + k$ und $n = 19$ sowie für $\beta_k = 2 + 2k$ und $n = 18$, 7 Dezimalstellen für $n = 15$ und $\beta_k = 1$ und schließlich 10 Dezimalstellen für $\beta_k = 1 + k$ und $n = 16$ sowie für $\beta_k = 1 + 2k$ und $n = 18$. Für größere n nahm die Genauigkeit wieder ab.

In den beiden Tabellen 3.12 und 3.13 schneidet die ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation ($\beta_k = \beta + k$) etwas besser als die Transformation $\Delta_n^{(0)}(29, s_0)$ ab, deren Modellfolge auf einer Entwicklung in Pochhammer-Symbolen $1/(-\gamma - n)_j$ beruht [368, Abschn. 9.2]. Man sollte beachten, daß diese $\Delta_k^{(n)}$ -Transformation sich als eine der besten bisher bekannten Summationsmethoden für die Euler-Reihe erwiesen hat. [368, Tab. 13-3, S. 330]

In den Tabellen 3.12 und 3.13 liest man ab, daß die Transformationen zu $\beta_k = \beta + k$ denen zu $\beta_k = \beta + 2k$ deutlich überlegen sind. Das heißt, daß die ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation in diesem Fall besser ist als die Weniger-Transformation (2.55). Dies ist in gewisser Weise verwandt zu Resultaten für die Summation der stark divergenten Störungsreihe für die Grundzustandsenergie anharmonischer Oszillatoren [371]. Dort stellte sich heraus, daß die Transformation (2.55) nicht die beste Methode war, sondern eine Folgentransformation, die man als eine Interpolation zwischen der Levin-Transformation und der Weniger-Transformation (2.55) ansehen kann. Aufgrund von Satz 3.20 für $\alpha = 1$ und Satz 3.4 ist die Levin-Transformation [222] ein Spezialfall der \mathcal{J} -Transformation zu

$$\delta_n^{(k)} = \frac{1}{(n + \beta)(n + \beta + k + 1)}, \quad (3.232)$$

während die Weniger-Transformation (2.55) dem Spezialfall

$$\delta_n^{(k)} = \frac{1}{(n + \beta + 2k)(n + \beta + 2k + 1)} \quad (3.233)$$

entspricht. Die Größen

$$\delta_n^{(k)} = \frac{1}{(n + \beta + k)(n + \beta + k + 1)}, \quad (3.234)$$

die die ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation ergeben, liegen also zwischen der Levin- und der Weniger-Transformation, soweit es den Abfall der $\delta_n^{(k)}$ für große n (oder große k) betrifft.

In den Tabellen 3.14 - 3.16 wird die Stieltjes-Reihe

$$\ln(1 + z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j z^{j+1}}{j + 1} = z {}_2F_1(1, 1; 2; -z), \quad (3.235)$$

mit Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n \frac{(-1)^j z^{j+1}}{j + 1}, \quad (3.236)$$

untersucht. Die entsprechende Stieltjes-Funktion ist

$$\frac{\ln(1 + z)}{z} = \int_0^1 \frac{1}{1 + zt} dt. \quad (3.237)$$

Der Konvergenzradius der Reihe ist Eins. Für $|z| > 1$ divergiert die Reihe, kann aber summiert werden, sofern z nicht auf dem Schnitt $-\infty < z \leq -1$ liegt.

Für $z = -0.9$ in Tabelle 3.14 ist die Reihe absolut konvergent und alle Terme haben gleiches Vorzeichen. In der Tabelle werden die t -Varianten ${}_p\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$, Gl. (3.30), für $p = 1$ entsprechend zu $\beta_k = 1$, für $p = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$, und $p = 3$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + 2k$ verglichen. Letztere ist identisch zur t -Variante der Weniger-Transformation (2.55). Die Daten können direkt mit Literaturergebnissen [368, Tab. 13-6, S. 337] verglichen werden. Dann erkennt man, daß die Transformation ${}_1\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ besser abschneidet als Wynns ϵ -Algorithmus [399], jedoch schlechter als die Levin- t -Transformation. Letztere ist der Transformation ${}_2\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ zu $\beta_k = 1 + k$ unterlegen. Am besten schneidet die Transformation ${}_3\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ ab, die identisch ist mit der Weniger- t -Transformation.

In DOUBLE PRECISION waren die besten Resultate 9 exakte Dezimalstellen für $\beta_k = 1$ und $n = 24$, 8 Stellen für $\beta_k = 1 + k$ und $n = 17$ sowie 8 Stellen für $\beta_k = 1 + 2k$ und $n = 16$. Dies ist ein deutlicher Stellenverlust, der aus dem gleichen Vorzeichen der Terme resultiert.

Für $z = 1$ ist die Reihe (3.235) alternierend und bedingt konvergent. Aufgrund der alternierenden Vorzeichen erwartet man eine relativ hohe numerische Stabilität der \mathcal{J} -Transformation. In Tabelle 3.15 wird dieser Fall behandelt. Wieder sind Resultate der t -Varianten ${}_p\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$, Gl. (3.30), für $p = 1$ entsprechend zu $\beta_k = 1$, für $p = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$ sowie für $p = 3$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + 2k$ miteinander verglichen. Im Gegensatz zur Tabelle 3.14 zeigt sich in diesem Falle, daß die beiden Transformationen ${}_2\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ und ${}_3\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ sehr ähnliche Resultate ergeben. Die Transformation ${}_1\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ ist den anderen beiden Transformationen in Tabelle 3.15 deutlich unterlegen, dem ϵ -Algorithmus aber deutlich überlegen [368, Tab. 13-5, S. 335]. Die Levin- t -Transformation ist für dieses Beispiel etwas schlechter als die Weniger- t -Transformation, die ja zu ${}_3\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$ identisch ist. Wie erwartet, beobachtet man in DOUBLE PRECISION keinen Stellenverlust abgesehen von einer gelegentlichen Abweichung in der letzten Stelle im Falle $\beta_k = 1$.

Für $z = 5$ ist die Reihe (3.235) alternierend und divergiert. Ihre Summation wird in Tabelle 3.16 behandelt. Wieder werden die t -Varianten ${}_p\mathbf{T}_0^{(n)}(1, \{s_n\})$, Gl. (3.30), für $p = 1$ entsprechend zu $\beta_k = 1$, für $p = 2$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + k$ sowie für $p = 3$ entsprechend zu $\beta_k = 1 + 2k$ verglichen. Für die Summation dieser divergenten Reihe ist die Variante zu $\beta_k = 1 + k$, also die ${}_2\mathbf{T}$ -Transformation, den Varianten zu $\beta_k = 1$ und $\beta_k = 1 + 2k$ überlegen. Die letzteren schneiden sehr ähnlich ab.

In DOUBLE PRECISION waren die besten Resultate 10 Dezimalstellen für $\beta_k = 1$ und $n = 13$, 13 Stellen für $\beta_k = 1 + k$ und $n = 14$ sowie 13 Stellen für $\beta_k = 1 + 2k$ und $n = 16$. Zumindest für die beiden letzten Varianten ist die numerische Stabilität unkritisch.

Wichtige Resultate der numerischen Test kann man folgendermaßen zusammenfassen:

- a) Die \mathcal{J} -Transformation kann erfolgreich mit den Restabschätzungen von Levin [222] und von Smith und Ford [328] kombiniert werden. Vor allem geeignete u -Varianten sind für weite Anwendungsbereiche geeignete Verfahren, ähnlich wie die u -Transformation von Levin. Sowohl für linear konvergente als auch für divergente Folgen

kann man t - und \tilde{t} -Varianten der \mathcal{J} -Transformation mit gutem Erfolg verwenden. Die \tilde{t} -Varianten sind den t -Varianten durchaus nicht immer überlegen. Für spezielle Beispiele, für die das asymptotische Verhalten der Reste analytisch behandelt werden kann, sind auch lineare Varianten der \mathcal{J} -Transformation nützlich.

- b) Die Transformation ${}_1\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ entsprechend zu $\beta_k = \beta$ und vor allem die Transformation ${}_2\mathbf{J}_n^{(k)}(\beta, \{s_n\}, \{\omega_n\})$ entsprechend zu $\beta_k = \beta + k$ sind sehr nützliche Konvergenzbeschleunigungsverfahren. Für logarithmisch konvergente Folgen sind die u -Varianten beider Transformationen ähnlich erfolgreich wie Levins u -Transformation [222]. Für alternierende divergente Reihen, sind die t - und \tilde{t} -Varianten der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation der Weniger-Transformation (2.55) vergleichbar oder überlegen.
- c) Die Wahl der Hierarchie (also der $\delta_n^{(k)}$) scheint wichtiger zu sein als der Unterschied zwischen t - und \tilde{t} -Varianten.
- d) Die numerische Stabilität der Verfahren ist ähnlich wie bei Levin-artigen Methoden. Die Behandlung logarithmischer Konvergenz stellt hier hohe Anforderungen. Die Stabilität ist groß für alternierende Reihen.
- e) Die Flexibilität der \mathcal{J} -Transformation ist sehr nützlich. Es ist leicht, offensichtlich erfolgreiche Transformationen durch eine problemangepaßte, heuristische Wahl von Restabschätzungen und Hierarchien zu erhalten. Zudem ist der Rechenaufwand dabei sehr gering.

Einige weitere Tests werden im Zusammenhang mit neuen Formen der Restabschätzung in einem folgenden Abschnitt besprochen.

Tabelle 3.10: Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 3$ mit $\omega_n = \Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 2$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 2 + k$
0	$0.10000 \cdot 10^1$	1.000000000000000	1.000000000000000	1.000000000000000
1	$0.66667 \cdot 10^0$	0.750000000000000	0.750000000000000	0.750000000000000
2	$0.88889 \cdot 10^0$	0.78947368421053	0.79245283018868	0.78947368421053
3	$0.66667 \cdot 10^0$	0.78593272171254	0.78551532033426	0.78605200945626
4	$0.96296 \cdot 10^0$	0.78627929326532	0.78631020098597	0.78625266933042
5	$0.46914 \cdot 10^0$	0.78625021075704	0.78625015781884	0.78625259721590
6	$0.14568 \cdot 10^1$	0.78625082355459	0.78625075906287	0.78625110624009
7	$-0.84774 \cdot 10^0$	0.78625136044654	0.78625127198120	0.78625121107364
8	$0.52977 \cdot 10^1$	0.78625119347619	0.78625122359883	0.78625122295100
9	$-0.13139 \cdot 10^2$	0.78625122362201	0.78625121976653	0.78625122083713
10	$0.48316 \cdot 10^2$	0.78625122105973	0.78625122076092	0.78625122072187
11	$-0.17702 \cdot 10^3$	0.78625122053322	0.78625122078671	0.78625122076540
12	$0.72431 \cdot 10^3$	0.78625122082790	0.78625122076556	0.78625122076700
13	$-0.31814 \cdot 10^4$	0.78625122075800	0.78625122076545	0.78625122076597
14	$0.15045 \cdot 10^5$	0.78625122076502	0.78625122076597	0.78625122076593
15	$-0.76089 \cdot 10^5$	0.78625122076677	0.78625122076597	0.78625122076595
16	$0.40996 \cdot 10^6$	0.78625122076573	0.78625122076596	0.78625122076596
17	$-0.23443 \cdot 10^7$	0.78625122076598	0.78625122076596	0.78625122076596
18	$0.14181 \cdot 10^8$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
19	$-0.90481 \cdot 10^8$	0.78625122076595	0.78625122076596	0.78625122076596
20	$0.60727 \cdot 10^9$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
21	$-0.42770 \cdot 10^{10}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
22	$0.31541 \cdot 10^{11}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
23	$-0.24306 \cdot 10^{12}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
24	$0.19538 \cdot 10^{13}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
25	$-0.16353 \cdot 10^{14}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
∞		0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596

Tabelle 3.11: Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 3$ mit $\omega_n = \Delta s_n$

n	s_n	$\beta_k = 2$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 2 + k$
0	$0.100 \cdot 10^1$	1.000000000000000	1.000000000000000	1.000000000000000
1	$0.667 \cdot 10^0$	0.800000000000000	0.800000000000000	0.800000000000000
2	$0.889 \cdot 10^0$	0.78431372549020	0.78260869565217	0.78431372549020
3	$0.667 \cdot 10^0$	0.78654970760234	0.78688524590164	0.78645396025749
4	$0.963 \cdot 10^0$	0.78620571035432	0.78616985565626	0.78623870322329
5	$0.469 \cdot 10^0$	0.78625739112551	0.78625771801346	0.78625087998944
6	$0.146 \cdot 10^1$	0.78625064276186	0.78625120934107	0.78625138039754
7	$-0.848 \cdot 10^0$	0.78625119704449	0.78625114927105	0.78625121289090
8	$0.530 \cdot 10^1$	0.78625125067849	0.78625122673316	0.78625121888162
9	$-0.131 \cdot 10^2$	0.78625121170107	0.78625122149488	0.78625122099971
10	$0.483 \cdot 10^2$	0.78625122248647	0.78625122061800	0.78625122079313
11	$-0.177 \cdot 10^3$	0.78625122062189	0.78625122075743	0.78625122076011
12	$0.724 \cdot 10^3$	0.78625122072420	0.78625122076954	0.78625122076542
13	$-0.318 \cdot 10^4$	0.78625122078909	0.78625122076610	0.78625122076611
14	$0.150 \cdot 10^5$	0.78625122076015	0.78625122076586	0.78625122076597
15	$-0.761 \cdot 10^5$	0.78625122076659	0.78625122076595	0.78625122076595
16	$0.410 \cdot 10^6$	0.78625122076611	0.78625122076596	0.78625122076595
17	$-0.234 \cdot 10^7$	0.78625122076586	0.78625122076596	0.78625122076596
18	$0.142 \cdot 10^8$	0.78625122076598	0.78625122076596	0.78625122076596
19	$-0.905 \cdot 10^8$	0.78625122076595	0.78625122076596	0.78625122076596
20	$0.607 \cdot 10^9$	0.78625122076595	0.78625122076596	0.78625122076596
21	$-0.428 \cdot 10^{10}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
22	$0.315 \cdot 10^{11}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
23	$-0.243 \cdot 10^{12}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
24	$0.195 \cdot 10^{13}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
25	$-0.164 \cdot 10^{14}$	0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596
∞		0.78625122076596	0.78625122076596	0.78625122076596

Tabelle 3.12: Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 1/2$ mit $\omega_n = \Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 2$	$\beta_k = 2 + k$	$\beta_k = 2 + 2k$
10	$0.35398 \cdot 10^{10}$	0.46145607136266	0.46145544783220	0.46145510103753
11	$-0.78210 \cdot 10^{11}$	0.46145509107350	0.46145529733994	0.46145532081696
12	$0.18838 \cdot 10^{13}$	0.46145526233532	0.46145529690317	0.46145534413495
13	$-0.49128 \cdot 10^{14}$	0.46145536413851	0.46145531132031	0.46145533224613
14	$0.13792 \cdot 10^{16}$	0.46145531281064	0.46145531651429	0.46145532242264
15	$-0.41471 \cdot 10^{17}$	0.46145530925975	0.46145531691022	0.46145531795752
16	$0.13297 \cdot 10^{19}$	0.46145531853231	0.46145531648110	0.46145531647059
17	$-0.45291 \cdot 10^{20}$	0.46145531689299	0.46145531626023	0.46145531613694
18	$0.16331 \cdot 10^{22}$	0.46145531568093	0.46145531621934	0.46145531613375
19	$-0.62144 \cdot 10^{23}$	0.46145531625635	0.46145531622933	0.46145531618269
20	$0.24889 \cdot 10^{25}$	0.46145531634198	0.46145531623913	0.46145531621740
21	$-0.10466 \cdot 10^{27}$	0.46145531621628	0.46145531624232	0.46145531623414
22	$0.46097 \cdot 10^{28}$	0.46145531622847	0.46145531624247	0.46145531624044
23	$-0.21225 \cdot 10^{30}$	0.46145531624980	0.46145531624210	0.46145531624219
24	$0.10197 \cdot 10^{32}$	0.46145531624279	0.46145531624189	0.46145531624238
25	$-0.51027 \cdot 10^{33}$	0.46145531624008	0.46145531624184	0.46145531624221
26	$0.26554 \cdot 10^{35}$	0.46145531624205	0.46145531624185	0.46145531624204
27	$-0.14349 \cdot 10^{37}$	0.46145531624219	0.46145531624186	0.46145531624193
28	$0.80408 \cdot 10^{38}$	0.46145531624176	0.46145531624187	0.46145531624189
29	$-0.46665 \cdot 10^{40}$	0.46145531624182	0.46145531624187	0.46145531624187
30	$0.28015 \cdot 10^{42}$	0.46145531624190	0.46145531624187	0.46145531624186
31	$-0.17378 \cdot 10^{44}$	0.46145531624187	0.46145531624187	0.46145531624186
32	$0.11128 \cdot 10^{46}$	0.46145531624185	0.46145531624187	0.46145531624186
33	$-0.73476 \cdot 10^{47}$	0.46145531624182	0.46145531624187	0.46145531624186
34	$0.49986 \cdot 10^{49}$	0.46145531624145	0.46145531624187	0.46145531624186
35	$-0.35005 \cdot 10^{51}$	0.46145531623742	0.46145531624187	0.46145531624187
∞		0.46145531624187	0.46145531624187	0.46145531624187

Tabelle 3.13: Summation der Reihe ${}_2F_0(1, 1; -1/z)$ für $z = 1/2$ mit $\omega_n = \Delta s_n$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 1 + 2k$
10	$0.35398 \cdot 10^{10}$	0.46145315541951	0.46145546514387	0.46145478452495
11	$-0.78210 \cdot 10^{11}$	0.46145425429325	0.46145523126840	0.46145524264073
12	$0.18838 \cdot 10^{13}$	0.46145596026037	0.46145527528229	0.46145533578430
13	$-0.49128 \cdot 10^{14}$	0.46145527912998	0.46145531120697	0.46145533653082
14	$0.13792 \cdot 10^{16}$	0.46145522721517	0.46145531885175	0.46145532598406
15	$-0.41471 \cdot 10^{17}$	0.46145534818892	0.46145531777895	0.46145531958535
16	$0.13297 \cdot 10^{19}$	0.46145532179262	0.46145531653531	0.46145531701552
17	$-0.45291 \cdot 10^{20}$	0.46145530928911	0.46145531617413	0.46145531625982
18	$0.16331 \cdot 10^{22}$	0.46145531718043	0.46145531617643	0.46145531613493
19	$-0.62144 \cdot 10^{23}$	0.46145531722130	0.46145531622219	0.46145531616450
20	$0.24889 \cdot 10^{25}$	0.46145531581628	0.46145531624179	0.46145531620445
21	$-0.10466 \cdot 10^{27}$	0.46145531617051	0.46145531624454	0.46145531622787
22	$0.46097 \cdot 10^{28}$	0.46145531633945	0.46145531624315	0.46145531623807
23	$-0.21225 \cdot 10^{30}$	0.46145531623155	0.46145531624210	0.46145531624153
24	$0.10197 \cdot 10^{32}$	0.46145531622546	0.46145531624179	0.46145531624231
25	$-0.51027 \cdot 10^{33}$	0.46145531624774	0.46145531624179	0.46145531624227
26	$0.26554 \cdot 10^{35}$	0.46145531624378	0.46145531624184	0.46145531624210
27	$-0.14349 \cdot 10^{37}$	0.46145531624025	0.46145531624186	0.46145531624197
28	$0.80408 \cdot 10^{38}$	0.46145531624183	0.46145531624187	0.46145531624191
29	$-0.46665 \cdot 10^{40}$	0.46145531624221	0.46145531624187	0.46145531624188
30	$0.28015 \cdot 10^{42}$	0.46145531624180	0.46145531624187	0.46145531624187
31	$-0.17378 \cdot 10^{44}$	0.46145531624181	0.46145531624187	0.46145531624186
32	$0.11128 \cdot 10^{46}$	0.46145531624189	0.46145531624187	0.46145531624186
33	$-0.73476 \cdot 10^{47}$	0.46145531624182	0.46145531624187	0.46145531624186
34	$0.49986 \cdot 10^{49}$	0.46145531624140	0.46145531624187	0.46145531624186
35	$-0.35005 \cdot 10^{51}$	0.46145531623794	0.46145531624187	0.46145531624187
∞		0.46145531624187	0.46145531624187	0.46145531624187

Tabelle 3.14: Beschleunigung der Reihe ${}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = -0.9$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 1 + 2k$
5	-1.919	-2.27954315047305	-2.28986131439088	-2.29512066836042
6	-1.987	-2.29255152474082	-2.29820668920652	-2.30050441124223
7	-2.041	-2.29821515108454	-2.30108778188842	-2.30201068101470
8	-2.084	-2.30068184561078	-2.30207506175652	-2.30242744827476
9	-2.119	-2.30175618724194	-2.30241181432121	-2.30254199436228
10	-2.147	-2.30222408980436	-2.30252632999967	-2.30257334141836
11	-2.171	-2.30242786913467	-2.30256519120788	-2.30258189482907
12	-2.190	-2.30251661822965	-2.30257835929323	-2.30258422385422
13	-2.207	-2.30255527018393	-2.30258281638654	-2.30258485705095
14	-2.220	-2.30257210408649	-2.30258432374790	-2.30258502899755
15	-2.232	-2.30257943578394	-2.30258483319556	-2.30258507564758
16	-2.242	-2.30258262901522	-2.30258500528580	-2.30258508829481
17	-2.250	-2.30258401980573	-2.30258506339306	-2.30258509172157
18	-2.257	-2.30258462556191	-2.30258508300655	-2.30258509264961
19	-2.263	-2.30258488940036	-2.30258508962498	-2.30258509290084
20	-2.269	-2.30258500431671	-2.30258509185778	-2.30258509296883
21	-2.273	-2.30258505436952	-2.30258509261089	-2.30258509298723
22	-2.277	-2.30258507617057	-2.30258509286486	-2.30258509299220
23	-2.280	-2.30258508566631	-2.30258509295049	-2.30258509299355
24	-2.283	-2.30258508980232	-2.30258509297937	-2.30258509299391
25	-2.286	-2.30258509160383	-2.30258509298910	-2.30258509299401
26	-2.288	-2.30258509238851	-2.30258509299238	-2.30258509299404
27	-2.290	-2.30258509273029	-2.30258509299348	-2.30258509299404
28	-2.291	-2.30258509287916	-2.30258509299386	-2.30258509299404
29	-2.293	-2.30258509294401	-2.30258509299398	-2.30258509299405
30	-2.294	-2.30258509297225	-2.30258509299402	-2.30258509299405
∞	-2.303	-2.30258509299405	-2.30258509299405	-2.30258509299405

Tabelle 3.15: Beschleunigung der Reihe ${}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = 1$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 1 + 2k$
5	0.617	0.69314752228759	0.69314712706300	0.69314726571364
6	0.760	0.69314715292958	0.69314718127769	0.69314718328808
7	0.635	0.69314718212288	0.69314718062868	0.69314718064517
8	0.746	0.69314718051087	0.69314718056011	0.69314718056257
9	0.646	0.69314718055803	0.69314718055987	0.69314718056003
10	0.737	0.69314718056042	0.69314718055994	0.69314718055995
11	0.653	0.69314718055990	0.69314718055995	0.69314718055995
12	0.730	0.69314718055995	0.69314718055995	0.69314718055995
13	0.659	0.69314718055995	0.69314718055995	0.69314718055995
14	0.725	0.69314718055995	0.69314718055995	0.69314718055995
15	0.663	0.69314718055995	0.69314718055995	0.69314718055995
∞	0.693	0.69314718055995	0.69314718055995	0.69314718055995

Tabelle 3.16: Summation der Reihe ${}_2F_1(1, 1; 2; -z)$ für $z = 5$ und $\omega_n = \Delta s_{n-1}$

n	s_n	$\beta_k = 1$	$\beta_k = 1 + k$	$\beta_k = 1 + 2k$
1	$-0.750 \cdot 10^{01}$	1.42857142857143	1.42857142857143	1.42857142857143
4	$0.503 \cdot 10^{03}$	1.79054054054054	1.79289001846092	1.79376911314985
7	$-0.398 \cdot 10^{05}$	1.79175081367333	1.79175637254577	1.79177804949714
10	$0.364 \cdot 10^{07}$	1.79175940186339	1.79175947649056	1.79175959220168
13	$-0.359 \cdot 10^{09}$	1.79175946873775	1.79175946921405	1.79175946997338
16	$0.370 \cdot 10^{11}$	1.79175946922487	1.79175946922807	1.79175946923241
19	$-0.394 \cdot 10^{13}$	1.79175946922804	1.79175946922806	1.79175946922808
22	$0.429 \cdot 10^{15}$	1.79175946922805	1.79175946922806	1.79175946922806
25	$-0.474 \cdot 10^{17}$	1.79175946922806	1.79175946922806	1.79175946922806
∞		1.79175946922806	1.79175946922806	1.79175946922806

Kapitel 4

Restabschätzungen für Levin-artige Verfahren

In diesem Kapitel werden Restabschätzungen für Levin-artige Folgentransformationen diskutiert. Eine neue Restabschätzung wird eingeführt, die mit der wohlbekannten Kummer-Transformation zusammenhängt. Es werden schließlich numerische Tests vorgeführt, die zeigen, daß diese neue Restabschätzung Levin-artige Folgentransformationen deutlich effizienter machen kann. Dieses Kapitel stützt sich auf [176].

4.1 Einleitung

Eine der populärsten nichtlinearen Folgentransformationen ist der berühmte ϵ -Algorithmus von Wynn [399] aus Gl. (2.25). Dieser ist sehr robust und hängt nur von den Folgeelementen s_n ab in einer durch den Algorithmus ein für allemal festgelegten Weise. Daher erlaubt er nicht, weitere Informationen über die Problemfolge einzubringen.

Ziemlich häufig sind allerdings zumindest qualitative oder auch asymptotische Informationen über das Problem bekannt. Natürlich erwartet man, daß Methoden, die diese zusätzliche Information nutzen, potentiell leistungsfähiger sind als Methoden, die dies nicht erlauben. In den letzten Jahrzehnten wurden Folgentransformationen und Extrapolationsverfahren entwickelt, die es ermöglichen, weitere Informationen neben den Werten der Folgeelemente $\{s_n\}$ einfließen zu lassen, wobei dies meist über Hilfsfolgen geschieht. Als ziemlich allgemeinen Rahmen für derartige Transformationen kann man die E -Transformation von Brezinski [52] und Håvie [154] ansehen, die ja wie wir wissen von Hilfsfolgen abhängt und durch Spezialisierung viele bekannte Methoden mit meist deutlich einfacheren Algorithmen ergibt.

Man nehme beispielsweise an, daß das asymptotische Verhalten der Terme a_m einer unendlichen Reihe bekannt ist. Kann man dann diese Information zur Konvergenzverbesserung der Teilsummen s_n diese speziellen Reihe nutzen? Die Antwort darauf ist positiv, da man Methoden finden kann, die auf Konvergenztests beruhen, die ja vom asymptotischen Verhalten der Terme der Reihe abhängen [239, 240, 241]. Alternativ kann man Methoden

benutzen, die auf Abschätzungen des Restes $s - s_n$ beruhen. Das bekannteste Beispiel für solche Methoden ist die Transformation von Levin [222], die explizite Restabschätzungen ω_n benutzt. Auf diese Weise kann die Levin-Transformation zusätzliche Informationen in den Algorithmus einfließen lassen, was schließlich dann häufig zu guten Resultaten bei Konvergenzbeschleunigung und Summation Anlaß gibt.

Da man die Restabschätzungen auch als eine Hilfsfolge $\{\omega_n\}$ auffassen kann, überrascht es nicht, daß die Levin-Transformation und andere Verfahren, die Restabschätzungen verwenden, [162, 160, 368] sich als Spezialfälle des E -Algorithmus auffassen lassen.

Die explizite Berücksichtigung der in den Restabschätzungen enthaltenen Informationen ist zugleich die große Stärke wie auch die große Schwäche dieser Methoden. Wenn man gute Restabschätzungen finden kann, die den Fehler der Problemfolge gut approximieren, dann sollten Levin-artige Transformationen sehr gut konvergieren. Wenn man jedoch keine derartigen Restabschätzungen finden kann, dann ist kaum ein Erfolg zu erwarten.

Die Bestimmung solcher *guter* Restabschätzungen ist also für den letztendlichen Erfolg der Levin-artigen Transformationen sehr wichtig. Einige neue Möglichkeiten für die Wahl der Restabschätzungen werden im folgenden diskutiert.

4.2 Methode

Man nehme an, daß man eine konvergente Reihe

$$s = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \quad (4.1)$$

mit Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n a_j \quad (4.2)$$

vorliegen hat, wobei man das asymptotische Verhalten der Terme a_j in führender Ordnung kennt:

$$a_j \sim \hat{a}_j, \quad j \rightarrow \infty. \quad (4.3)$$

In diesem Fall konvergieren die Partialsummen

$$\hat{s}_n = \sum_{j=0}^n \hat{a}_j \quad (4.4)$$

der unendlichen Reihe

$$\hat{s} = \sum_{j=0}^{\infty} \hat{a}_j. \quad (4.5)$$

Man kann dann die Kummer-Transformation (vgl. z.B. das Buch von Knopp [209, p. 269])

$$s'_n = \hat{s} + \sum_{j=0}^n (a_j - \hat{a}_j) = \hat{s} + s_n - \hat{s}_n, \quad (4.6)$$

verwenden, um eine schneller konvergente Reihe mit Partialsummen $\{s'_n\}$ zu konstruieren, die ebenfalls den Grenzwert s hat:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} s'_n = s. \quad (4.7)$$

Wie wir schon wissen, gibt es andererseits Folgentransformationen, die — neben den Elementen der ursprünglichen Folge — auch von Restabschätzungen

$$\omega_n \sim s_n - s \quad (4.8)$$

abhängen. Beispiele sind die Levin-Transformation, die Weniger-Transformation und die \mathcal{J} -Transformation.

Es ist bekannt [368, Abschn. 12–14], daß viele Folgentransformationen mit expliziten Restabschätzungen die Konvergenz beschleunigen, falls — zusätzlich zu mehr technischen Bedingungen — die Bedingung

$$\frac{s_n - s}{\omega_n} = O(1), \quad n \rightarrow \infty \quad (4.9)$$

erfüllt ist. Deshalb ist eine erfolgreiche Wahl der Restabschätzungen von immenser Bedeutung für Erfolg oder Mißerfolg eines Verfahrens zur Konvergenzbeschleunigung oder Summation. Außerdem wird auch die Konvergenzgeschwindigkeit der transformierten Folge durch die Restabschätzung bestimmt.

Bei gegebener Problemfolge s_n steht man vor dem praktischen Problem, eine Folge von Restabschätzungen zu finden, die Gl. (4.9) erfüllen. Hier sollte man zunächst bemerken, daß die asymptotische Bedingung Gl. (4.9) die Restabschätzungen nicht eindeutig festlegt. Im Prinzip kann man für eine gegebene Folge $\{s_n\}$ eine unbegrenzte Anzahl von Restabschätzungen finden, die alle Gl. (4.9) erfüllen.

Wir erinnern an die Einteilung nach hyperlinearer, linearer und logarithmischer Konvergenz, die sich auf Gl. (2.1) stützt. Diese Klassifizierung nach Konvergenztypen beeinflußt selbstverständlich auch die Suche geeigneter Restabschätzungen.

Die auf Levin zurückgehenden Restabschätzungen (2.10a), (2.10c) und (2.10d) kann man im Falle einer Reihe mit Termen $a_n = \Delta s_{n-1}$ als

$$\begin{aligned} {}^t\omega_n &= a_n, \\ {}^u\omega_n &= (n + \beta)a_n, \quad \beta > 0, \\ {}^v\omega_n &= \frac{a_n a_{n+1}}{a_n - a_{n+1}}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

schreiben. Hier haben wir zum Zwecke der folgenden Diskussion die Notation leicht verändert und die Variante jeweils als linken, oberen Index deutlich gemacht. Ebenso schreiben wir jetzt

$$\tilde{t}\omega_n = a_{n+1} \quad (4.11)$$

für die \tilde{t} -Variante (2.10b). Die t - und \tilde{t} -Varianten sind geeignet für lineare Konvergenz. Außerdem kann man sie auch für die Summation divergenter Potenzreihen einsetzen [368,

376, 378]. Die u - und v -Varianten kann man auch im Falle logarithmischer Konvergenz nutzen.

Nehmen wir an, daß eine Reihe \hat{s} bekannt ist, deren Terme \hat{a}_n sich für $n \rightarrow \infty$ wie die Terme a_n der Reihe s verhalten, gemäß der asymptotischen Bedingung (4.3). Dann kann man auch die Terme \hat{a}_n als Restabschätzungen für die Folge $\{s_n\}$ benutzen, wobei man

$$\begin{aligned} {}^l\omega_n &= \hat{a}_n, \\ {}^u\omega_n &= (n + \beta)\hat{a}_n, \quad \beta > 0, \\ {}^v\omega_n &= \frac{\hat{a}_n\hat{a}_{n+1}}{\hat{a}_n - \hat{a}_{n+1}}, \\ {}^{\tilde{l}}\omega_n &= \hat{a}_{n+1} \end{aligned} \tag{4.12}$$

setzt. In Gl. (4.12) wurde der zusätzliche obere Index l verwendet, um zu betonen, daß diese Restabschätzungen für Levin-artige Algorithmen zu Folgentransformationen führen, die *linear* in den Inputdaten $\{s_n\}$ sind. Dies impliziert jedoch nicht, daß auf diese Weise erhaltene Folgentransformationen lineare Funktionen des Argumentes von Potenzreihen sind, wenn die Partialsummen von Potenzreihen transformiert werden. In solchen Fällen ist die asymptotisch verwandte Reihe \hat{s} ebenfalls eine Potenzreihe und die resultierenden Transformationen sind *rationale* Funktionen des Argumentes der Potenzreihe.

Angeregt durch die Kummer-Transformation (4.6) wollen wir eine weitere Restabschätzung über

$${}^k\omega_n = \hat{s}_n - \hat{s} \tag{4.13}$$

einführen. Für jede Levin-artige Transformation erhält man damit eine neue Variante, die wir die *k-Variante bezüglich der Folge \hat{s}_n* oder kurz *k-Variante* der jeweiligen Transformation nennen wollen. Dies bedeutet, daß in einer k -Variante als Restabschätzung der Problemfolge s_n der *exakte* Rest der asymptotische verwandten Folge \hat{s}_n verwendet wird.

Dies kann man auch in einer anderen Weise interpretieren. Um den Rest von s_n abzuschätzen, vergleicht man den *Schwanz*

$$S_n = a_{n+1} + a_{n+2} + \cdots \tag{4.14}$$

mit dem von anderen Reihen

$${}^iS_n = s_{n+1} - s_n = a_{n+1} + 0 + \cdots, \tag{4.15}$$

$${}^{\tilde{l}}S_n = \hat{s}_{n+1} - \hat{s}_n = \hat{a}_{n+1} + 0 + \cdots, \tag{4.16}$$

$${}^kS_n = \hat{s} - \hat{s}_n = \hat{a}_{n+1} + \hat{a}_{n+2} + \cdots. \tag{4.17}$$

Es scheint damit plausibel, daß der Schwanz (4.17) dem Schwanz (4.16) überlegen sein kann, um den Schwanz (4.14) abzuschätzen, da man zumindest für die asymptotisch verwandte Reihe das exakte Resultat verwendet. In dieser heuristischen Interpretation vernachlässigt man jedoch, daß für Levin-artige Verfahren die Restabschätzungen nur bis auf einen multiplikativen Faktor bekannt sein müssen, da diese Verfahren invariant unter $\omega_n \rightarrow c\omega_n$ für $c \neq 0$ sind. Man vergleiche hierzu auch Gl. (4.9).

Angesichts der Vielzahl verschiedener Konvergenzbeschleunigungs- und Summationsprobleme, die in der Praxis auftauchen können, ist es wahrscheinlich nicht möglich, eine allgemeine Antwort auf die Frage zu finden, welche der oben vorgestellten Restabschätzungen optimale Resultate liefert. Dies muß im Einzelfall durch numerische Untersuchungen geklärt werden.

Um die Nützlichkeit der neuen Restabschätzung zu zeigen, genügt es, Beispiele anzugeben, für die diese Abschätzung anderen überlegen ist. Es wird nicht behauptet, daß die k -Variante den anderen Varianten stets überlegen ist. Es wird nur angeregt, diese Variante neben anderen anzuwenden, wenn dies möglich ist, das heißt, wenn asymptotische Abschätzungen der Terme vorhanden sind und die entsprechende asymptotisch verwandte Reihe in geschlossener Form aufsummiert werden kann.

Es gibt eine weitere Frage, die numerisch für bestimmte Beispiele untersucht wird: Welche der folgenden Zugänge ist am besten?

1. Die Verwendung der Kummer-Transformation ohne weitere Konvergenzbeschleunigung.
2. Die Verwendung der Kummer-Transformation mit anschließender, weiterer Konvergenzbeschleunigung.
3. Die Verwendung von k -Varianten von Transformationen, die mit Restabschätzungen arbeiten.

Wieder ist nicht nötig, daß die Antwort auf diese Frage allgemeingültig ist, noch wird es behauptet.

4.3 Numerische Beispiele

Als erstes Beispiel behandeln wir die schon bekannte $1/z$ -Entwicklung (3.219). Um eine geeignete asymptotisch verwandte Reihe zu finden, kann man Gl. (3.222) benutzen. Es folgt

$$a_m = \hat{k}_{m-1/2}(z) / [2^m m!] \sim \hat{a}_m = (1/2)_{m-1} / [2 m!]. \quad (4.18)$$

Wir müssen die Reihe \hat{s} der Terme \hat{a}_m auswerten. Dies ergibt

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_{m-1}}{m!} = 0. \quad (4.19)$$

Hierbei wurde $(1/2)_{-1} = -2$ und [368, S. 349, Gl. 14.3-20],

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(1/2)_m}{(m+1)!} = 2 \quad (4.20)$$

benutzt. Wegen $\hat{s} = 0$ kann man die Partialsummen der asymptotisch verwandten Reihe als das Negative der Schwänze (4.17) schreiben. Der entstehende Ausdruck kann mittels

Tabelle 4.1: Vergleich der k -Variante mit anderen Varianten für logarithmische Konvergenz Beschleunigung der $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$ mittels der ${}_1\mathbf{J}$ -Transformation (3.29) mit $\beta = 1/2$ und verschiedenen Varianten für ω_n . Es gilt $\hat{a}_n = (1/2)_{n-1}/(2n!)$.

n	ω_n			
	${}^u\omega_n$	${}^l\omega_n$	$\omega_n = (n+1)^{-1/2}$	${}^k\omega_n$
0	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465	0.5616612051465
2	1.0441621062120	1.0346390621120	1.3402778834228	1.2677495773307
4	1.2344590561626	1.2441144717550	1.2474059560937	1.2492068735789
6	1.2497238969666	1.2494201974297	1.2500910901060	1.2500403110143
8	1.2501759545590	1.2499732170772	1.2499958452236	1.2499973278785
10	1.2499682133207	1.2499982601328	1.2500002099615	1.2500001534639
12	1.2500020835907	1.2499998911472	1.2499999926654	1.249999931519
14	1.2499998954210	1.249999936133	1.250000003150	1.250000002378
16	1.250000024541	1.249999995931	1.249999999964	1.249999999936
18	1.249999999381	1.249999999752	1.250000000003	1.250000000001
20	1.249999999977	1.249999999985	1.250000000000	1.250000000000
∞	1.250000000000	1.250000000000	1.250000000000	1.250000000000

[289, p. 49, Theorem 18] vereinfacht werden. Man erhält

$$\begin{aligned}\hat{s}_n &= -\frac{1}{2} \sum_{m=n+1}^{\infty} \frac{(1/2)_{m-1}}{m!} = -\frac{(1/2)_n}{2(n+1)!} {}_2F_1(1, n+1/2; n+2; 1) \\ &= -\frac{(1/2)_n}{2(n+1)!} \frac{\Gamma(n+2)\Gamma(1/2)}{\Gamma(n+1)\Gamma(3/2)} = -\frac{(1/2)_n}{n!} = -\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}.\end{aligned}\quad (4.21)$$

Dies vergleiche man mit Gl. (3.223). Man erhält demnach

$${}^k\omega_n = -\frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\quad (4.22)$$

als k -Variante der Restabschätzung. Da die \mathcal{J} -Transformation gemäß Satz 3.2 multiplikativ invariant in ω_n ist, kann man dies auch zu

$${}^k\omega_n = c \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!}\quad (4.23)$$

für beliebige $c \neq 0$ verallgemeinern. Die k -Variante entspricht also genau einer der linearen Varianten aus den Tabellen 3.6, 3.7, 3.8 und 3.9.

In Tabelle 4.1 vergleichen wir verschiedene Varianten der \mathcal{J} -Transformation bei Anwendung auf die $1/z$ -Entwicklung für $z = 4/5$. Dieser Wert wurde auch in den Tabellen 3.8 und 3.9 verwendet. Wir verwenden stets ${}_1\mathbf{J}_0^{(n)}(\beta, \{s_\nu\}_{\nu=0}^n, \{\omega_\nu\}_{\nu=0}^n)$. Zum Vergleich gilt

$s_{20} = 1.125$. Die Resultate in Tabelle 4.1 zeigen, daß die nichtlineare u -Variante ähnliche Ergebnisse liefert wie die lineare lu -Variante zu $\omega_n = (n+1)\hat{a}_n$ (vgl. Gl. (4.12)), aber bei weitem schlechter abschneidet als die k -Variante und die lineare Variante zu $\omega_n = (n+1)^{-1/2}$. Für größere n verhalten sich die Varianten in den letzten beiden Spalten von Tabelle 4.1 sehr ähnlich, was wegen

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (n+1)^{1/2} \frac{(2n-1)!!}{(2n)!!} = 1 \quad (4.24)$$

nicht überrascht. Für kleinere n schneidet die k -Variante etwas besser ab als die lineare Variante mit $\omega_n = (n+1)^{-1/2}$.

Als zweites Beispiel betrachten wir die Berechnung der in der Quantenchemie wohlbekannten F_m -Funktionen, die durch [146]

$$F_m(z) = \int_0^1 u^{2m} \exp(-zu^2) du \quad (4.25)$$

definiert sind, über die linear-konvergente Potenzreihe

$$F_m(z) = \sum_{j=0}^{\infty} (-z)^j / j!(2m+2j+1). \quad (4.26)$$

Offensichtlich ist die Reihe

$$\hat{s} = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-z)^j}{(j+1)!} \quad (4.27)$$

mit Partialsummen

$$\hat{s}_n = \frac{1}{2} \sum_{j=0}^n \frac{(-z)^j}{(j+1)!} \quad (4.28)$$

und Wert

$$\hat{s} = \frac{1 - e^{-z}}{2z} \quad (4.29)$$

zur Reihe (4.26) asymptotisch verwandt im Sinne von Kummer. Als k -Variante der Restabschätzung kann man demnach

$${}^k\omega_n = c \left((1 - e^{-z})/z - \sum_{j=0}^n (-z)^j / (j+1)! \right). \quad (4.30)$$

mit einem beliebigen $c \neq 0$ verwenden. Zur Berechnung verwenden wir in diesem Fall die ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation mit $\beta = 1$ und erhalten die Ergebnisse in Tabellen 4.2 und 4.3. Man sieht, daß in beiden Fällen die k -Variante der t -, diese der u -Variante überlegen ist.

Weitere Beispiele für den Fall linearer Konvergenz werden in Abschnitt 9.3 angegeben. Auch dort zeigt sich, daß eine geeignete k -Variante in Verbindung mit Levin-artigen Transformationen zu einer deutlichen Verbesserung der Konvergenz im Vergleich mit anderen Varianten führt.

Tabelle 4.2: Vergleich der k -, t - und u -Varianten für lineare Konvergenz
Beschleunigung der Reihe (4.26) für $z = 4$ und $m = 0$ mittels der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation
(3.29) mit $\beta = 1$.

n	s_n	${}^u\omega_n$	${}^t\omega_n$	${}^k\omega_n$
3	-0.257	0.43136150234742	0.44406779661017	0.44089391738692
4	0.928	0.44059344340751	0.44052606934180	0.44102641238881
5	0.152	0.44093125531403	0.44107731493954	0.44104046050598
6	0.590	0.44103732133151	0.44103797626077	0.44104066226450
7	0.373	0.44104015694010	0.44104082957819	0.44104069556696
8	0.469	0.44104067826428	0.44104068908252	0.44104069531915
9	0.431	0.44104069384092	0.44104069560068	0.44104069538189
10	0.445	0.44104069532701	0.44104069537374	0.44104069538113
11	0.440	0.44104069537814	0.44104069538140	0.44104069538121
12	0.441	0.44104069538110	0.44104069538121	0.44104069538121
13	0.441	0.44104069538121	0.44104069538121	0.44104069538121

Tabelle 4.3: Vergleich der k -, t - und u -Varianten für lineare Konvergenz
Beschleunigung der Reihe (4.26) für $z = 8$ und $m = 0$ mittels der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation
(3.29) mit $\beta = 1$.

n	s_n	${}^u\omega_n$	${}^t\omega_n$	${}^k\omega_n$
3	-7.457	0.28872412727834	0.32616984402080	0.31272764551944
4	11.506	0.31085083112389	0.30790633519758	0.31316461281120
5	-13.318	0.31207469068192	0.31433516321814	0.31329808013987
6	14.688	0.31328823054436	0.31311468768915	0.31330696806662
7	-13.052	0.31327793459650	0.31333560995231	0.31330867146679
8	11.425	0.31330893088482	0.31330538568704	0.31330867250119
9	-8.042	0.31330826887725	0.31330901934190	0.31330868777436
10	6.048	0.31330869027997	0.31330865784273	0.31330868721431
11	-3.308	0.31330868392332	0.31330868956263	0.31330868732586
12	2.431	0.31330868731153	0.31330868716851	0.31330868732074
13	-0.839	0.31330868730303	0.31330868733044	0.31330868732131
14	0.900	0.31330868732101	0.31330868732080	0.31330868732128
15	0.032	0.31330868732123	0.31330868732132	0.31330868732128

Kapitel 5

Methoden für Orthogonalentwicklungen

Fourier-Reihen

$$s = a_0/2 + \sum_{j=1}^{\infty} (a_j \cos(j\alpha) + b_j \sin(j\alpha)) \quad (5.1)$$

mit Partialsummen

$$s_n = a_0/2 + \sum_{j=1}^n (a_j \cos(j\alpha) + b_j \sin(j\alpha)) \quad (5.2)$$

sind die einfachsten Orthogonalentwicklungen. Beschreiben sie nicht beliebig oft differenzierbare Funktionen des Argumentes α , so fallen die Koeffizienten a_n und b_n in der Regel nur wie $n^{-\gamma}$, $\gamma > 0$, für große n . [134] Dies führt zu langsamer Konvergenz, falls γ eine kleine Zahl ist. Daher versuchte man schon relativ früh, die Konvergenz zu beschleunigen. Dazu verwendete man meist lineare Verfahren. Als Beispiele seien genannt das Verfahren von Jones und Hardy [198], das von Shaw, Johnson und Riess [316], Tasche [354], Baszenski und Delvos [23] und Baszenski, Delvos und Tasche [24] ausgebaut wurde, ferner das Verfahren von Kiefer und Weiss [208], das auf partieller Summation beruht, die Methoden von Longman (siehe [229] und darin enthaltene Referenzen), die auf Darstellung von Fourier-Reihen als Integralen von Potenzreihen basieren, und schließlich Arbeiten von Boyd [41], der Verallgemeinerungen der Euler-Transformation für Fourier-Reihen untersuchte.

Fourier-Reihen stellen die meisten herkömmlichen nichtlinearen Extrapolationsverfahren, die für Potenzreihen erfolgreich sind, vor besondere Probleme. Dies hängt mit dem komplizierteren Vorzeichenmuster der Terme bei Fourier-Reihen zusammen. Man kann auch sagen, daß Fourier-Reihen Summen von mehreren Potenzreihen sind, zumindest in den beiden Variablen $\exp(+i\alpha)$ und $\exp(-i\alpha)$, möglicherweise auch in noch mehr Variablen, wenn die Koeffizienten a_n und b_n selbst noch oszillierende Bestandteile aufweisen.

Eine gewisse Ausnahme stellt der ϵ -Algorithmus dar. Der Grund dafür ist, daß laut Satz 2.1 dieser Algorithmus für Folgen exakt ist, deren Terme sich als Linearkombinationen von Potenzen λ_j^n , $\lambda_j \in \mathbb{C}$, mit polynomialen Koeffizienten darstellen lassen. Dies heißt aber auch, daß die Partialsummen von Fourier-Reihen mit polynomialen Koeffizienten als

Kern des ϵ -Algorithmus aufgefaßt werden können.

Auch die $d^{(m)}$ -Transformationen sind, wie Sidi gezeigt hat [323], in der Lage, Fourier-Reihen zu beschleunigen, verlangen allerdings für $m > 1$ einen höheren Aufwand zur Berechnung als die weiter unten zu besprechenden Verfahren.

Es gibt für das Extrapolationsproblem von Fourier-Reihen mehrere prinzipielle Lösungen: Man kann zum einen gänzlich neue Extrapolationsverfahren ersinnen. Dies kann man durch geeignete Verallgemeinerung von Modellfolgen oder durch Iteration einfacher Folgentransformationen erreichen. Andererseits ergeben sich durch Umformulieren des Problems Möglichkeiten, auch Verfahren für Potenzreihen erfolgreich einzusetzen. Hierzu ist die Darstellung gewisser einfacher reeller Fourier-Reihen durch den Realteil geeigneter komplexer Potenzreihen zu rechnen. Dies kann man, wie wir sehen werden, auf kompliziertere Fourier-Reihen verallgemeinern.

Außerdem kann man analoge Verfahren für Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen einführen, wie wir im folgenden sehen werden.

5.1 Levin-artige Algorithmen für Fourier-Reihen

Dieser Abschnitt stützt sich auf [159].

5.1.1 Modellfolge der \mathcal{H} -Transformation

Wir verfolgen den ersten der oben beschriebenen Wege und verallgemeinern die Modellfolge. Anstelle der Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n \sum_{j=0}^{k-1} c_j (n + \beta)^{-j}, \quad (5.3)$$

die zur Levin-Transformation führt, betrachten wir die verwandte, aber kompliziertere Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n \left(\exp(i\alpha n) \sum_{j=0}^{k-1} c_j (n + \beta)^{-j} + \exp(-i\alpha n) \sum_{j=0}^{k-1} d_j (n + \beta)^{-j} \right). \quad (5.4)$$

Diese hängt von zwei zusätzlichen Phasenfaktoren ab. Diese Modellfolge kann man motivieren durch Betrachtung des Restes einer Fourier-Reihe,

$$\begin{aligned} s - s_n &= \sum_{j=n+1}^{\infty} (a_j \cos(j\alpha) + b_j \sin(j\alpha)) \\ &= \sum_{k=1}^{\infty} (a_{k+n} \cos((k+n)\alpha) + b_{k+n} \sin((k+n)\alpha)), \end{aligned} \quad (5.5)$$

wobei s_n die in Gl. (5.2) definierten Partialsummen der Fourier-Reihe sind. Unter Verwendung der Additionstheoreme der trigonometrischen Funktionen sieht man ein, daß

Terme auftreten, die proportional zu $\sin(n\alpha)$ und $\cos(n\alpha)$ oder, was äquivalent ist, zu den Phasenfaktoren $\exp(\pm in\alpha)$ sind. Genauer kann man den Rest $\rho_n = s - s_n$ als

$$\rho_n = \cos(n\alpha)A_n(\alpha) + \sin(n\alpha)B_n(\alpha) \quad (5.6)$$

schreiben, mit

$$\begin{aligned} A_n(\alpha) &= - \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ a_{k+n} \cos(k\alpha) + b_{k+n} \sin(k\alpha) \right\}, \\ B_n(\alpha) &= - \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ -a_{k+n} \sin(k\alpha) + b_{k+n} \cos(k\alpha) \right\}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Wenn man jetzt Poincaré-artige, asymptotische Entwicklungen

$$\begin{aligned} A_n(\alpha) &\sim \omega_n \sum_{j=0}^{\infty} \gamma_j (n + \beta)^{-j}, \\ B_n(\alpha) &\sim \omega_n \sum_{j=0}^{\infty} \delta_j (n + \beta)^{-j} \end{aligned} \quad (5.8)$$

für große n annimmt, so gelangt man bei Beschränkung auf die ersten k Terme zu der Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n \left(\cos(\alpha n) \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j (n + \beta)^{-j} + \sin(\alpha n) \sum_{j=0}^{k-1} \delta_j (n + \beta)^{-j} \right). \quad (5.9)$$

Diese ist zur Modellfolge (5.4) äquivalent, wenn man die Identifizierungen

$$\gamma_j = c_j + d_j, \delta_j = i(c_j - d_j) \quad (5.10)$$

vornimmt.

Die Modellfolge (5.4) ist tatsächlich ein vernünftiges Modell für Fourierreihen mit nichtoszillierenden Koeffizienten, wie wir sehen werden.

Wir bemerken, daß die Modellfolge (5.4) auch ein Spezialfall des Ansatzes ist, der zu dem *generalized Richardson extrapolation process* (GREP) von Sidi [317] führt. Die Modellfolge ist ferner, wie bei vielen anderen Transformationen auch, ein Spezialfall des Kerns (2.16) der E -Transformation, wenn man dort ein doppelt so großes und demnach gerades $K = 2k$ und

$$g_j(n) = \omega_n \begin{cases} \exp(i\alpha n)(n + \beta)^{1-j} & \text{für } j = 1, \dots, k \\ \exp(-i\alpha n)(n + \beta)^{k+1-j} & \text{für } j = k + 1, \dots, K \end{cases} \quad (5.11)$$

verwendet, so daß man eine entsprechenden rekursiven Algorithmus über die relativ komplizierten, mehrdimensionalen Rekursionen (2.19) oder (2.21) definieren kann.

Wir werden im nächsten Abschnitt zeigen, daß es einen wesentlich einfacheren Algorithmus gibt.

5.1.2 Herleitung der \mathcal{H} -Transformation

Jetzt werden wir eine nichtlineare, Levin-artige Folgentransformation herleiten, die für die Modellfolge (5.4) exakt ist. Dazu nehmen wir hier und im folgenden an, daß $\exp(2i\alpha) \neq 1$ und $\omega_n \neq 0$ für alle n gilt.

Wir führen das Polynom $P^{(2k)}$ vom Grade $2k$ über

$$P^{(2k)}(x) = [x^2 - 2 \cos(\alpha) x + 1]^k = \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} x^m \quad (5.12)$$

ein. Es gilt $P^{(2k)}(0) = 1$. Dieses Polynom hat Nullstellen der Ordnung k bei $e^{i\alpha}$ und $e^{-i\alpha}$. Die Koeffizienten $p_m^{(2k)}$, die in Gl. (5.12) definiert sind, kann man benutzen, um eine lineare Rekursion mit $(2k + 1)$ Termen und konstanten Koeffizienten zu definieren, die $P^{(2k)}(x)$ als charakteristisches Polynom besitzt:

$$\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} v_{m+n} = 0 \quad (n \geq 0). \quad (5.13)$$

Da das charakteristische Polynom mehrfache Nullstellen hat, sind die $2k$ linear unabhängigen Lösungen von (5.13) durch [30, S. 41]

$$v_n^{(j,\pm)} = n^j e^{\pm i\alpha n} \quad (0 \leq j \leq k-1) \quad (5.14)$$

gegeben. Wir wenden nun Gl. (5.13) auf $(n + \beta)^{k-1} (s_n - s)/\omega_n$ an, um den Grenzwert s zu bestimmen. Man erhält

$$\begin{aligned} & \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \frac{s_{n+m} - s}{\omega_{n+m}} = \\ & \sum_{j=0}^{k-1} c_{k-1-j} \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^j e^{i\alpha(n+m)} \\ & + \sum_{j=0}^{k-1} d_{k-1-j} \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^j e^{-i\alpha(n+m)}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Demnach kann man die rechte Seite der letzten Gleichung als Linearkombination von Termen der Form (5.14) schreiben. Es folgt, daß die linke Seite von Gl. (5.15) verschwindet. Auflösen nach $s = s_n^{(k)}$ ergibt

$$\begin{aligned} s_n^{(k)} &= \mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}) = \mathcal{Z}_n^{(k)} / \mathcal{N}_n^{(k)} \\ \mathcal{Z}_n^{(k)} &= \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \frac{s_{n+m}}{\omega_{n+m}}; \\ \mathcal{N}_n^{(k)} &= \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \frac{1}{\omega_{n+m}} \end{aligned} \quad (5.16)$$

Die Transformation (5.16), das Hauptergebnis dieses Abschnittes, ist linear, wenn die Restabschätzungen ω_n unabhängig von den Partialsummen oder Fourier-Koeffizienten der Reihe sind, sonst aber nichtlinear.

Als eine kleine Modifikation dieser Formeln kann man Zähler und Nenner durch $(n + \beta + 2k)^{k-1}$ dividieren. Dadurch wird die Größe der typischen Terme der Summen in Zähler und Nenner reduziert und Overflow vermieden. Dann ergibt sich

$$\begin{aligned} s_n^{(k)} &= \mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, s_n, \omega_n) = \hat{\mathcal{Z}}_n^{(k)} / \hat{\mathcal{N}}_n^{(k)} \\ \hat{\mathcal{Z}}_n^{(k)} &= \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \frac{(n + \beta + m)^{k-1}}{(n + \beta + 2k)^{k-1}} \frac{s_{n+m}}{\omega_{n+m}} \\ \hat{\mathcal{N}}_n^{(k)} &= \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \frac{(n + \beta + m)^{k-1}}{(n + \beta + 2k)^{k-1}} \frac{1}{\omega_{n+m}}. \end{aligned} \quad (5.17)$$

5.1.3 Rekursive Berechnung der \mathcal{H} -Transformation

In diesem Abschnitt wird ein effizienter Algorithmus für die Berechnung der \mathcal{H} -Transformation (5.16) abgeleitet.

Sowohl Zähler $\mathcal{Z}_n^{(k)}$ und Nenner $\mathcal{N}_n^{(k)}$ in Gl. (5.16) haben die gemeinsame Struktur

$$\mathcal{M}_n^{(k)} = \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} t_{n+m}^{(k)}; \quad \mathcal{M}_n^{(0)} = t_n^{(0)} \quad (5.18)$$

mit $t_m^{(k)} = (m + \beta)^{k-1} / \omega_m$ für den Nenner und $t_m^{(k)} = (m + \beta)^{k-1} s_m / \omega_m$ für den Zähler ($k \geq 0$). Man sieht leicht ein, daß in beiden Fällen

$$t_m^{(k)} = (m + \beta) t_m^{(k-1)} \quad (k \geq 1) \quad (5.19)$$

gilt. In Verbindung mit den beiden folgenden Rekursionsbeziehungen für die Koeffizienten des charakteristischen Polynomes,

$$p_m^{(2k)} = p_m^{(2k-2)} + p_{m-2}^{(2k-2)} - 2 \cos(\alpha) p_{m-1}^{(2k-2)} \quad (0 \leq m \leq 2k), \quad (5.20)$$

und

$$m p_m^{(2k)} = 2k \left(p_{m-2}^{(2k-2)} - \cos(\alpha) p_{m-1}^{(2k-2)} \right) \quad (0 \leq m \leq 2k), \quad (5.21)$$

erlaubt Gl. (5.19) die rekursive Berechnung von Zähler und Nenner der Transformation (5.16). Gleichungen (5.20) und (5.21) folgen direkt aus der Definition (5.12) des charakteristischen Polynoms und Betrachtung seiner Ableitung. Beide Rekursionsbeziehungen sind für alle m gültig, wenn man Koeffizienten $p_m^{(2k)}$ für alle m -Werte außerhalb des Bereichs $0 \leq m \leq 2k$ gleich Null setzt.

Um die für Zähler und Nenner von Gl. (5.16) identische Rekursionsbeziehung zu erhalten, benutzen wir Gl. (5.19) in Gl. (5.18) und verwenden die Beziehungen (5.20) und (5.21), um alle Koeffizienten p mit oberem Index $2k$ zu eliminieren. Nach einigen Indextransformationen und unter Verwendung von Gl. (5.18) ergibt sich als Resultat die folgende Rekursionsbeziehung, die das zentrale Ergebnis dieses Abschnittes ist:

$$\mathcal{M}_n^{(k)} = (n + \beta) \mathcal{M}_n^{(k-1)} + (n + 2k + \beta) \mathcal{M}_{n+2}^{(k-1)} - 2 \cos(\alpha) (n + k + \beta) \mathcal{M}_{n+1}^{(k-1)}. \quad (5.22)$$

Mit dieser Rekursionsbeziehung kann man sowohl Zähler als auch Nenner der Transformation (5.16) berechnen. Anfangswerte sind dabei

$$\mathcal{N}_m^{(0)} = (m + \beta)^{-1} \frac{1}{\omega_m}; \quad \mathcal{Z}_m^{(0)} = (m + \beta)^{-1} \frac{s_m}{\omega_m}. \quad (5.23)$$

Insgesamt erhalten wir also den folgenden Algorithmus

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_n^{(0)} &= (n + \beta)^{-1} s_n / \omega_n, & \mathcal{N}_n^{(0)} &= (n + \beta)^{-1} / \omega_n, \\ \mathcal{Z}_n^{(k)} &= (n + \beta) \mathcal{Z}_n^{(k-1)} + (n + 2k + \beta) \mathcal{Z}_{n+2}^{(k-1)} - 2 \cos(\alpha) (n + k + \beta) \mathcal{Z}_{n+1}^{(k-1)}, \\ \mathcal{N}_n^{(k)} &= (n + \beta) \mathcal{N}_n^{(k-1)} + (n + 2k + \beta) \mathcal{N}_{n+2}^{(k-1)} - 2 \cos(\alpha) (n + k + \beta) \mathcal{N}_{n+1}^{(k-1)}, \\ \frac{\mathcal{Z}_n^{(k)}}{\mathcal{N}_n^{(k)}} &= \mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}). \end{aligned} \quad (5.24)$$

In ähnlicher Weise erfüllen sowohl $\hat{\mathcal{Z}}_n^{(k)}$ und auch $\hat{\mathcal{N}}_n^{(k)}$ aus Gl. (5.17) die Rekursionsbeziehung

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{M}}_n^{(k)} &= \hat{\mathcal{M}}_{n+2}^{(k-1)} - 2 \cos(\alpha) \frac{n + \beta + k}{n + \beta + 2k} \left[\frac{n + \beta + 2k - 1}{n + \beta + 2k} \right]^{k-2} \hat{\mathcal{M}}_{n+1}^{(k-1)} \\ &+ \frac{n + \beta}{n + \beta + 2k} \left[\frac{n + \beta + 2k - 2}{n + \beta + 2k} \right]^{k-2} \hat{\mathcal{M}}_n^{(k-1)}. \end{aligned} \quad (5.25)$$

5.1.4 Eigenschaften der \mathcal{H} -Transformation

Wie im Falle der \mathcal{J} -Transformation ist auch die \mathcal{H} -Transformation invariant unter Translation und homogen in s_n und demnach quasilinear [55],[59, Abschn. 1.4]. Die folgenden Sätze ergeben sich direkt aus Gl. (5.16):

Satz 5.1

Die \mathcal{H} -Transformation ist quasilinear, das heißt, es gilt

$$\mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{As_n + B\}, \{\omega_n\}) = A \mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}) + B \quad (5.26)$$

für beliebige Konstanten A und B .

Satz 5.2

Die \mathcal{H} -Transformation ist multiplikativ invariant in ω_n , das heißt, es gilt

$$\mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}, \{C\omega_n\}) = \mathcal{H}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}) \quad (5.27)$$

für jede Konstante $C \neq 0$.

Für das folgende nehmen wir an, daß die Parameter α und β fest vorgegeben sind. Uns interessieren Bedingungen an die Wahl der Restabschätzungen $\{\omega_n\}$, die garantieren, daß die \mathcal{H} -Transformation wohldefiniert ist.

Unter diesen Voraussetzungen hängt die Transformation $\mathcal{H}_n^{(k)}$ nur von den $(4k + 2)$ Zahlen $\{s_{n+j}\}_{j=0}^{2k}$ und $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^{2k}$ ab. Man kann also schreiben

$$\mathcal{H}_n^{(k)} = \gamma_n^{(k)}(s_n, s_{n+1}, \dots, s_{n+2k} \mid \omega_n, \omega_{n+1}, \dots, \omega_{n+2k}) \quad (5.28)$$

und die Transformation als Abbildung

$$\begin{aligned} \gamma_n^{(k)}: \quad & \mathbb{C}^{2k+1} \times Y_n^{(k)} \longrightarrow \mathbb{C}, \\ & ((x_1, \dots, x_{2k+1}), (y_1, \dots, y_{2k+1})) \longrightarrow \gamma_n^{(k)}(x_1, \dots, x_{2k+1} \mid y_1, \dots, y_{2k+1}) \end{aligned} \quad (5.29)$$

auffassen. Hier ist $Y_n^{(k)}$ eine geeignete Untermenge von \mathbb{C}^{2k+1} : Da die \mathcal{H} -Transformation von den Inversen der Restabschätzungen ω_n abhängt, ist eine notwendige Bedingung, daß keine Komponente irgendeines Vektors in $Y_n^{(k)}$ verschwindet. Unter dieser Voraussetzung folgt aus der Darstellung (5.16), daß $\mathcal{H}_n^{(k)}$ eine stetige Funktion von $\{\omega_{n+j}\}_{j=0}^{2k}$ ist, wenn

$$\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \frac{1}{\omega_{n+m}} \neq 0 \quad (5.30)$$

gilt, das heißt, wenn der Nenner in Gl. (5.16) nicht verschwindet. Das ist äquivalent zu der Aussage, daß $\gamma_n^{(k)}$ eine stetige Funktion von (y_1, \dots, y_{2k+1}) ist, wenn

$$\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \frac{1}{y_{m+1}} \neq 0 \quad (5.31)$$

erfüllt ist. Wir definieren also

$$Y_n^{(k)} = \left\{ \vec{y} \in \mathbb{C}^{2k+1} \mid \prod_{j=1}^{2k+1} y_j \neq 0 \text{ und (5.31) gilt.} \right\} \quad (5.32)$$

Dies ist eine offene Menge. Dann ist $\gamma_n^{(k)}$ definiert und stetig auf $\mathbb{C}^{2k+1} \times Y_n^{(k)}$.

Wie im Falle der \mathcal{J} -Transformation kann man $\gamma_n^{(k)}$ via

$$\gamma_n^{(k)} = \frac{L_n^{(k)}((x_1/y_1, \dots, x_{2k+1}/y_{2k+1}))}{L_n^{(k)}((1/y_1, \dots, 1/y_{2k+1}))} \quad (5.33)$$

über die Linearform

$$L_n^{(k)}(\vec{v}) = \sum_{j=1}^{2k+1} \lambda_{n,j}^{(k)} v_j, \quad \vec{v} \in \mathbb{C}^{2k+1} \quad (5.34)$$

darstellen, deren Koeffizienten durch

$$\lambda_{n,j}^{(k)} = p_{j+1}^{(2k)} (n + \beta + j + 1)^{k-1} \quad (5.35)$$

gegeben sind. Folglich ist $\gamma_n^{(k)}$ linear in den ersten $(2k + 1)$ Variablen. Ferner ist die Transformation exakt für konstante Folgen, das heißt, es gilt

$$\gamma_n^{(k)}(c, c, \dots, c \mid y_1, \dots, y_{2k+1}) = c. \quad (5.36)$$

Die Bedingung (5.31) kann man auch als

$$L_n^{(k)}\left(\left(1/y_1, \dots, 1/y_{2k+1}\right)\right) \neq 0 \quad (5.37)$$

formulieren. Insgesamt ist damit der folgende Satz bewiesen:

Satz 5.3

(H-0) $\mathcal{H}_n^{(k)}$ aus Gl. (5.16) kann als stetige Abbildung $\gamma_n^{(k)}$ auf $\mathbb{C}^{2k+1} \times Y_n^{(k)}$ angesehen werden, wobei $Y_n^{(k)}$ in (5.32) definiert ist.

(H-1) Aufgrund der Sätze 5.1 und 5.2 ist $\gamma_n^{(k)}$ eine homogene Funktion vom ersten Grade in den ersten $(2k+1)$ Variablen und eine homogene Funktion vom nullten Grade in den letzten $(2k+1)$ Variablen. Für alle Vektoren $\vec{x} \in \mathbb{C}^{2k+1}$ und $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ und für alle komplexen Konstanten λ und $\mu \neq 0$ gilt demnach

$$\begin{aligned} \gamma_n^{(k)}(\lambda\vec{x} | \vec{y}) &= \lambda\gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}), \\ \gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \mu\vec{y}) &= \gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}). \end{aligned} \quad (5.38)$$

(H-2) $\gamma_n^{(k)}$ ist linear in den ersten $(2k+1)$ Variablen. Für alle Vektoren $\vec{x} \in \mathbb{C}^{2k+1}$, $\vec{x}' \in \mathbb{C}^{2k+1}$, und $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ gilt also

$$\gamma_n^{(k)}(\vec{x} + \vec{x}' | \vec{y}) = \gamma_n^{(k)}(\vec{x} | \vec{y}) + \gamma_n^{(k)}(\vec{x}' | \vec{y}). \quad (5.39)$$

(H-3) Für alle konstanten Vektoren $\vec{c} = (c, c, \dots, c) \in \mathbb{C}^{2k+1}$ und alle Vektoren $\vec{y} \in Y_n^{(k)}$ gilt

$$\gamma_n^{(k)}(\vec{c} | \vec{y}) = c. \quad (5.40)$$

5.1.5 Theoretische Konvergenzaussagen für die \mathcal{H} -Transformation

Der folgende Satz zeigt, daß die Modellfolge (5.4) das Verhalten der Partialsummen spezieller Fourier-Reihen richtig beschreiben kann, wenn man die Restabschätzungen ω_n entsprechend wählt.

Satz 5.4

Die Transformation (5.16) ist exakt für Fourier-Reihen des Typs

$$s = \sum_{m=0}^{\infty} q^m (A \cos(\alpha m) + B \sin(\alpha m)) \quad (5.41)$$

wenn die Partialsummen

$$s_n = \sum_{m=0}^n q^m (A \cos(\alpha m) + B \sin(\alpha m)) \quad (5.42)$$

verwendet und die Restabschätzungen als $\omega_n = c q^n$ gewählt werden, sofern die Beziehungen $0 < |q| < 1$ und $c \neq 0$ gelten.

Beweis: Explizites Nachrechnen zeigt, daß der Rest der Fourier-Reihe (5.41) durch

$$s - s_n = q^n \left(\cos(n\alpha) \sum_{j=1}^{\infty} q^j (A \cos j\alpha + B \sin j\alpha) + \sin(n\alpha) \sum_{j=1}^{\infty} q^j (B \cos j\alpha - A \sin j\alpha) \right). \quad (5.43)$$

gegeben ist. Dies aber ist von der Form der Modellfolge (5.4) für jedes $k \geq 1$. Dies beendet den Beweis, da die \mathcal{H} -Transformation für diese Modellfolge nach Konstruktion exakt ist. \square

Der folgende Satz zeigt Bedingungen auf, unter denen die \mathcal{H} -Transformation die Konvergenz beschleunigt.

Satz 5.5

Man nehme an, daß s_n gegen s konvergiert, daß $\omega_n \neq 0$ für alle n gilt, daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n - s}{\omega_n \cos(\alpha n + \phi)} = \rho \neq 0, \quad (5.44)$$

und daß

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \omega_n / \omega_{n+1} = \sigma \notin \{\exp(i\alpha), \exp(-i\alpha)\} \quad (5.45)$$

gilt, wobei α, ϕ, ρ und σ reelle Konstanten sind. Dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = 0. \quad (5.46)$$

Beweis: Die Annahmen implizieren $\lim_{n \rightarrow \infty} \omega_n / \omega_{n+m} = \sigma^m$ für $m \geq 0$ und

$$\frac{s_{n+m} - s}{\omega_{n+m} \rho \cos(\alpha n + \phi)} \rightarrow \frac{\cos(\alpha(n+m) + \phi)}{\cos(\alpha n + \phi)} = \cos(m\alpha) - \sin(m\alpha) \tan(\alpha n + \phi) \quad (5.47)$$

für $n \rightarrow \infty$. Mit Gl. (5.16) folgt, daß

$$\begin{aligned} \frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} &\rightarrow \frac{\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (s_{n+m} - s) / \omega_{n+m}}{\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} / \omega_{n+m}} \frac{1}{\omega_n \rho \cos(\alpha n + \phi)} \\ &\rightarrow \frac{\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} [\cos(m\alpha) - \sin(m\alpha) \tan(\alpha n + \phi)]}{\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \sigma^m} \end{aligned} \quad (5.48)$$

gilt. Unter Verwendung der Definition der Koeffizienten $p_m^{(2k)}$ kann man den Nenner des letzten Bruchs als

$$\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \sigma^m = (\sigma^2 - 2 \cos(\alpha) \sigma + 1)^k \neq 0 \quad (5.49)$$

schreiben. Aber der Zähler verschwindet, da sowohl $\cos(m\alpha)$ als auch $\sin(m\alpha)$ Lösungen der Rekursionsbeziehung (5.13) sind. Damit ist alles gezeigt. \square

Der vorangegangene Satz gibt Bedingungen, unter denen Konvergenzbeschleunigung auftritt. Allerdings macht er keine Aussagen über die Geschwindigkeit, mit der die transformierte Folge konvergiert. Dies wird vom folgenden Satz geleistet.

Satz 5.6

Man nehme an, daß s_n gegen s konvergiert, daß $\omega_n \neq 0$ für alle n gilt und daß Gl. (5.45) mit reellen Konstanten α und σ erfüllt ist. Man nehme ferner an, daß die asymptotische Entwicklung

$$\frac{s_n - s}{\omega_n} \sim \exp(i\alpha n) \sum_{j=0}^{\infty} c_j (n + \beta)^{-j} + \exp(-i\alpha n) \sum_{j=0}^{\infty} d_j (n + \beta)^{-j} \quad (5.50)$$

mit $||c_0| - |d_0|| \geq \tau > 0$ gilt. Dann gilt für große n

$$\frac{s_n^{(k)} - s}{s_n - s} = O(n^{-2k}). \quad (5.51)$$

Beweis: Einfache Algebra unter Verwendung von Gl. (5.16) zeigt wie in der Herleitung des Algorithmus, daß die Anwendung der Rekursionsbeziehungen (5.13) auf $(n + \beta)^{k-1} (s_n - s)/\omega_n$ alle Terme mit Koeffizienten $(c_j, d_j, 0 \leq j < k)$ der asymptotischen Entwicklung (5.50) eliminiert. In führender Ordnung in $1/n$ gilt

$$s_n^{(k)} = s + (1 + O(1/n)) \frac{\omega_n (n + \beta + 2k)^{1-k}}{\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} (n + \beta + m)^{k-1} \omega_n / [(n + \beta + 2k)^{k-1} \omega_{n+m}]} \times \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \left(c_k \frac{\exp(i\alpha(n+m))}{n + \beta + m} + d_k \frac{\exp(-i\alpha(n+m))}{n + \beta + m} \right). \quad (5.52)$$

Der Nenner in dieser Formel geht für $n \rightarrow \infty$ zu $\sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \sigma^m$, was aufgrund von Gl. (5.49) nicht verschwindet. Der Beweis wird vervollständigt durch die Anwendung des folgenden Lemmas. \square

Lemma 5.7

Für die Koeffizienten $p_m^{(2k)}$, die in Gl. (5.12) definiert sind, gilt für $n \rightarrow \infty$

$$C_n := \sum_{m=0}^{2k} p_m^{(2k)} \exp(\pm i\alpha m) (n + \beta + m)^{-1} = O(n^{-k-1}). \quad (5.53)$$

Beweis: Verwendet man $(n + \beta + m)^{-1} = \int_0^\infty \exp(-t(n + \beta + m)) dt$ und die Definition (5.12) der Koeffizienten $p_m^{(2k)}$, so kann man die endliche Summe in Gl. (5.53) durch ein Integral ausdrücken, für das man die führende Ordnung leicht ausrechnen kann. Es gilt $C_n = 2^k \exp(\pm i\alpha k) J_k(n + \beta + k, \pm\alpha)$ und ($a \geq k$)

$$J_k(a, b) := \int_0^\infty \exp(-ta) [\cos(b + it) - \cos(b)]^k dt = \frac{\Gamma(k+1)}{a^{k+1}} (-i \sin(b))^k (1 + O(1/a)). \quad (5.54)$$

Die Abschätzung für $J_k(a, b)$ in der letzten Zeile dieser Gleichung folgt daraus, daß die Taylor-Reihe von $[\cos(b + it) - \cos(b)]^k$ bei $t = 0$ mit t^k beginnt. \square

5.1.6 Implementierung der \mathcal{H} -Transformation

Der in dem vorangehenden Abschnitt abgeleitete Algorithmus läßt sich mit sehr geringen Speicheransprüchen implementieren. Betrachtet man den Algorithmus (5.24), so scheint es, als ob man für eine Computerimplementierung des Algorithmus zwei zweidimensionale Felder benötigen würde, eines für den Zähler und eines für den Nenner. Die Einträge dieser Felder bezeichnen wir mit $\mathcal{M}_n^{(k)}$, und betrachten also eine \mathcal{M} -Tafel. Die Rekursion hat die Gestalt

$$\begin{array}{cc} \mathcal{M}_n^{(k-1)} & \mathcal{M}_n^{(k)} \\ \mathcal{M}_{n+1}^{(k-1)} & \\ \mathcal{M}_{n+2}^{(k-1)} & \end{array} \quad (5.55)$$

in dieser Tafel. Die Verwendung zweier zweidimensionaler Felder ist glücklicherweise nicht nötig. Zwei *eindimensionale* Felder reichen aus, wenn man maximalen Gebrauch von den Inputdaten $\{s_n, \omega_n\}$ macht. Man speichert nur den Rand der Tafel mit den Werten $\mathcal{M}_n^{(k)}$. Diese ist im folgenden Diagramm gezeigt, wobei k die Spalten und n die Zeilen numeriert:

$$\begin{array}{ccccc} x & x & x & x & o \\ x & x & x & o & c_5 \\ x & x & x & o & \\ x & x & o & c_4 & \\ x & x & o & & \\ x & o & c_3 & & \\ x & o & & & \\ o & c_2 & & & \\ o & & & & \\ c_1 & & & & \end{array} \quad (5.56)$$

Hier entsprechen die Elemente der ersten Spalte $\mathcal{M}_n^{(0)}$ für $0 \leq n \leq 9$. Zwischen Aufrufen des Programms, das den Algorithmus implementiert, sind die äußersten rechten Elemente jeder Zeile gespeichert. Das heißt, daß Elemente, die mit x bezeichnet sind, bei früheren Aufrufen des Programms abgespeichert oder berechnet wurden, aber jetzt überschrieben sind von Elementen, die mit o bezeichnet sind. Diese Elemente sind abgespeichert vor einem neuen Aufruf des Programms. Während dieses Aufrufs werden die Elemente c_1, c_2, \dots, c_5 unter Verwendung der Rekursion neu berechnet in der durch den Index angezeigten Reihenfolge. Das bei einem Aufruf zuletzt berechnete Element wird als neuer Schätzwert für den Grenzwert s zurückgegeben. Ist der n -Wert des neuen Inputpaares (s_n, ω_n) gerade, so ist das das Element am rechten Ende der ersten, sonst das der zweiten Zeile. Formal

Tabelle 5.1: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \exp(\alpha)$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 0.1$

n	s_n	$s'_n = s_{n-2}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}$	$ (s_n - s)/s $	$ (s'_n - s)/s $
6	$0.83683 \cdot 10^0$	$0.1102315242033053 \cdot 10^1$	$0.243 \cdot 10^0$	$0.258 \cdot 10^{-2}$
8	$0.81715 \cdot 10^0$	$0.1105088948886982 \cdot 10^1$	$0.261 \cdot 10^0$	$0.742 \cdot 10^{-4}$
10	$0.82031 \cdot 10^0$	$0.1105169251302396 \cdot 10^1$	$0.258 \cdot 10^0$	$0.151 \cdot 10^{-5}$
12	$0.83502 \cdot 10^0$	$0.1105170892969688 \cdot 10^1$	$0.244 \cdot 10^0$	$0.227 \cdot 10^{-7}$
14	$0.85665 \cdot 10^0$	$0.1105170917743048 \cdot 10^1$	$0.225 \cdot 10^0$	$0.301 \cdot 10^{-9}$
16	$0.88274 \cdot 10^0$	$0.1105170918071651 \cdot 10^1$	$0.201 \cdot 10^0$	$0.362 \cdot 10^{-11}$
18	$0.91171 \cdot 10^0$	$0.1105170918075610 \cdot 10^1$	$0.175 \cdot 10^0$	$0.342 \cdot 10^{-13}$
20	$0.94238 \cdot 10^0$	$0.1105170918075647 \cdot 10^1$	$0.147 \cdot 10^0$	$0.402 \cdot 10^{-15}$
s	$0.11052 \cdot 10^1$	$0.1105170918075648 \cdot 10^1$		

kann man dies als

$$M(n - 2k) \leftarrow \mathcal{M}_{n-2k}^{(k)} \quad (5.57)$$

für $0 \leq k \leq \lfloor n/2 \rfloor$ schreiben, wobei $M(0:NMAX)$ ein (Fortran-)Feld ist. Die Folgentransformation ist dann

$$s_0, \dots, s_n \mapsto s_{n-2}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}. \quad (5.58)$$

Ein Fortran 77-Programm GTRLEV, das diesen Algorithmus implementiert, ist im Anhang D abgedruckt.

Die Implementierung der \mathcal{J} - sowie der in späteren Abschnitten eingeführten \mathcal{I} - und \mathcal{K} -Transformationen kann ganz analog erfolgen. Insofern ist dieser Abschnitt exemplarisch für all diese Transformationen zu sehen.

5.1.7 Numerische Tests der \mathcal{H} -Transformation

In Tabelle 5.1 werden die Partialsummen s_n der Fourier-Reihe

$$s = (\exp(\pi) - \exp(-\pi))/\pi \left[1/2 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2 + 1} (\cos(n\alpha) - n \sin(n\alpha)) \right] \quad (5.59)$$

von $f(\alpha) = \exp(\alpha)$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 0.1$ verglichen mit den Elementen der transformierten Folge $s_n^{(k)}$, die man mit der \mathcal{H} -Transformation erhält. Zusätzlich sind die relativen Fehler gegeben. Die transformierte Folge konvergiert im Gegensatz zur ursprünglichen Folge der Partialsummen sehr schnell.

Die Berechnung wurde in FORTRAN 77 DOUBLE PRECISION durchgeführt, was nur 14-15 Dezimalstellen entspricht. Dennoch wurden keine Anzeichen numerischer Instabilitäten entdeckt. Sogar für $n = 99$ waren die Resultate, die in der Tabelle nicht gezeigt sind, völlig stabil.

Tabelle 5.2: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe von $f(\alpha) = 1 + \alpha$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$

n	s_n	$s'_n = s_{n-2\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}$	$ (s_n - s)/s $	$ (s'_n - s)/s $
6	$0.19557 \cdot 10^1$	$0.2000992552449739 \cdot 10^1$	$0.222 \cdot 10^{-1}$	$0.496 \cdot 10^{-3}$
8	$0.18961 \cdot 10^1$	$0.2000025026055583 \cdot 10^1$	$0.520 \cdot 10^{-1}$	$0.125 \cdot 10^{-4}$
10	$0.20965 \cdot 10^1$	$0.2000000528885243 \cdot 10^1$	$0.482 \cdot 10^{-1}$	$0.264 \cdot 10^{-6}$
12	$0.20041 \cdot 10^1$	$0.2000000009316978 \cdot 10^1$	$0.203 \cdot 10^{-2}$	$0.466 \cdot 10^{-8}$
14	$0.19272 \cdot 10^1$	$0.200000000131545 \cdot 10^1$	$0.364 \cdot 10^{-1}$	$0.658 \cdot 10^{-10}$
16	$0.20499 \cdot 10^1$	$0.200000000001584 \cdot 10^1$	$0.249 \cdot 10^{-1}$	$0.792 \cdot 10^{-12}$
18	$0.20202 \cdot 10^1$	$0.200000000000021 \cdot 10^1$	$0.101 \cdot 10^{-1}$	$0.104 \cdot 10^{-13}$
20	$0.19447 \cdot 10^1$	$0.200000000000001 \cdot 10^1$	$0.276 \cdot 10^{-1}$	$0.444 \cdot 10^{-15}$
∞	$0.20000 \cdot 10^1$	$0.200000000000000 \cdot 10^1$		

In Tabelle 5.2 wird die Folgentransformation (5.23) auf die Partialsummen s_n der Fourier-Reihe

$$s = 1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \sin(n\alpha) \quad (5.60)$$

von $f(\alpha) = 1 + \alpha$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$ angewandt. Wieder sind auch die relativen Fehler gegeben. Die Fourier-Reihe selbst konvergiert etwas schneller als die Fourier-Reihe in Tabelle 5.1. Ihre Konvergenz wird wiederum durch die Folgentransformation erheblich beschleunigt.

In diesen numerischen Tests war stets

$$\omega_n = \mu(a_n, b_n), \quad \mu(x, y) = \begin{cases} x & \text{für } |x| \geq |y| \\ y & \text{sonst} \end{cases} \quad (5.61)$$

gewählt.

In Tabelle 5.3 werden Ergebnisse für die Fourier-Reihe

$$\ln(1 - 2q \cos(\theta) + q^2) = -2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{q^j}{j} \cos(j\theta); \quad s_n = -2 \sum_{j=1}^{n+1} \frac{q^j}{j} \cos(j\theta) \quad (5.62)$$

für verschiedene Werte von θ und q gezeigt. Man beachte, daß die Funktion für

$$q = \exp(\pm i\theta) \quad (5.63)$$

singulär wird. Verglichen werden die Transformation (5.16) und der ϵ -Algorithmus, der über das Programm EPSAL von Weniger [368] berechnet wurde. In diesen numerischen Tests wurde $\omega_n = (n+1)a_n$ gewählt. Hierbei sind $a_n = q^{n+1}/(n+1)$ die Fourier-Koeffizienten der Reihe (5.62). In der Tabelle werden die Zahlen exakter Stellen verglichen,

Tabelle 5.3: Vergleich der \mathcal{H} -Transformation (5.16) mit Wynn's ϵ -Algorithmus für die Fourier-Reihe (5.62).

θ	$q = 1/2$						$q = 3/4$						$q = 1$						$q = 5$					
10^{-8}	14	22	21	15	23	27	6	10	13	9	14	17	-2	-6	-3	0	0	0	0	0	0	-1	0	-1
30	15	23	24	5	7	7	8	13	18	2	3	3	4	6	9	0	1	0	0	0	0	-2	-4	-4
60	15	23	29	10	17	23	10	17	22	5	10	15	8	12	17	4	7	12	0	0	0	0	0	0
90	17	26	32	3	5	7	13	21	28	1	3	3	11	17	23	1	1	1	4	7	8	-1	0	-1
120	20	30	32	14	22	29	17	27	32	11	18	24	15	23	32	10	15	20	8	13	17	3	6	8
150	22	33	33	6	8	8	19	29	31	3	4	4	17	27	31	2	2	2	9	14	19	0	-2	-4
180	23	33	32	20	30	*	19	29	31	17	26	31	17	27	31	15	23	31	9	15	19	7	11	15

Dargestellt sind für jedes q die Zahlen $m_{20} m_{30} m_{40} m'_{20} m'_{30} m'_{40}$, die durch $m_n = -\lg |(s - s'_n)/t|$, $m'_n = -\lg |(s - s''_n)/t|$ (gerundet zu ganzzahligen Werten) definiert sind. Es gilt $t = s$ für $s \neq 0$ und $t = 1$ sonst. Die Werte zu Gl. (5.16) benutzen $s'_n = s_{n-2\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}$, während für den ϵ -Algorithmus $s''_n = \epsilon_{2\lfloor n/2 \rfloor}^{(n-2\lfloor n/2 \rfloor)}$ benutzt wird. Ein Stern (*) bedeutet, daß das Programm EPSAL [368] für diesen Wert von n einen Wert 10^{60} zurückgegeben hat. In diesem Fall ist volle Genauigkeit (32-33 Stellen) für einen kleineren Wert von n erzielt worden. Der Wert von θ ist in Grad angegeben.

die man auf der Grundlage der Partialsummen bis $n = 20, 30, 40$ der Reihe mit dem jeweiligen Algorithmus erzielen kann.

Verschiedene Schlüsse können aufgrund dieser Daten gezogen werden. Erstens ist die \mathcal{H} -Transformation für den vorliegenden Fall dem ϵ -Algorithmus in großen Bereichen der Parameter weit überlegen, solange man nicht nahe einer Singularität der Fourier-Reihe ist. Zweitens ist der ϵ -Algorithmus für bestimmte Werte von θ besonders schlecht, da der Algorithmus sich auf falschen Werten stabilisiert. Drittens kann die \mathcal{H} -Transformation auch divergente Fourier-Reihen summieren (siehe Tabelle 5.3 für $q = 5$), ist in diesem Fall jedoch anscheinend anfälliger für die Nähe von Singularitäten als für $|q| < 1$. Wir werden die Rolle von Singularitäten noch gesondert studieren.

5.1.8 Verallgemeinerung auf mehrere Frequenzen

Das Verfahren zur Herleitung der \mathcal{H} -Transformation kann man auf Modellfolgen mit mehreren Frequenzen verallgemeinern. Dies soll hier nur kurz angerissen werden. Wir setzen $e_m = \exp(i\alpha_m)$ für $m = 1, \dots, M$. Eine Verallgemeinerung der Modellfolge (5.4) ist dann

$$s_n = s + \omega_n \sum_{m=1}^M e_m^n \sum_{j=0}^{k-1} c_{m,j} (n + \beta)^{-j}. \quad (5.64)$$

Die Modellfolge (5.4) kann man als den Spezialfall $M = 2$, $\alpha_1 = \alpha$, $\alpha_2 = -\alpha$ auffassen.

Um s für die Modellfolge (5.64) zu berechnen, müssen wir einen Algorithmus angeben, mit dessen Hilfe man die Koeffizienten $c_{m,j}$ exakt eliminieren kann. Dazu führen wir ein verallgemeinertes charakteristisches Polynom $P(x)$ vom Grade $M \cdot k$ ein, das k -fache Nullstellen bei allen e_m hat, also durch

$$P(x) = \prod_{m=1}^M (x - e_m)^k = \sum_{l=0}^{M \cdot k} p_l x^l \quad (5.65)$$

gegeben ist. Es ist charakteristisches Polynom zur Rekursion

$$\sum_{l=0}^{M \cdot k} p_l v_{l+n} = 0 \quad (n \geq 0). \quad (5.66)$$

Da die Nullstellen k -fach sind, sind die $M \cdot k$ linear unabhängigen Lösungen dieser Rekursion mit $(M \cdot k + 1)$ Termen und konstanten Koeffizienten durch

$$v_{n,m,l} = n^l e_m^n, \quad l = 0, \dots, k-1, \quad m = 1, \dots, M \quad (5.67)$$

gegeben. Ähnlich wie im Fall der \mathcal{H} -Transformation kann man nun den Grenzwert s der Modellfolge (5.64) exakt über

$$s = \frac{\sum_{m=0}^{M \cdot k} p_m (n + \beta + m)^{k-1} s_{n+m} / \omega_{n+m}}{\sum_{m=0}^{M \cdot k} p_m (n + \beta + m)^{k-1} / \omega_{n+m}} \quad (5.68)$$

ausrechnen bzw. die Folgentransformation

$$s_n^{(k)} = \frac{\sum_{m=0}^{M \cdot k} p_m (n + \beta + m)^{k-1} s_{n+m} / \omega_{n+m}}{\sum_{m=0}^{M \cdot k} p_m (n + \beta + m)^{k-1} / \omega_{n+m}} \quad (5.69)$$

einführen.

Die Koeffizienten p_m sind dabei von k , M und den Frequenzen α_j abhängig. Verfährt man wie im Fall der \mathcal{H} -Transformation, so sieht man nach kurzer Rechnung, daß Zähler und Nenner wieder eine identische, hier allerdings etwas kompliziertere Rekursion erfüllen. Es gilt

$$\mathcal{M}_n^{(k)} = \sum_{j=0}^M q_j (n + \beta + j \cdot k) \mathcal{M}_{n+j}^{(k-1)}, \quad (5.70)$$

wobei die Koeffizienten q_j durch

$$\prod_{m=1}^M (x - e_m) = \sum_{j=0}^M q_j x^j \quad (5.71)$$

definiert sind. Auf diese Weise erhält man den folgenden rekursiven Algorithmus zur Berechnung der verallgemeinerten \mathcal{H} -Transformation

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_n^{(0)} &= (n + \beta)^{-1} s_n / \omega_n, & \mathcal{N}_n^{(0)} &= (n + \beta)^{-1} / \omega_n, \\ \mathcal{Z}_n^{(k)} &= \sum_{j=0}^M q_j (n + \beta + j \cdot k) \mathcal{Z}_{n+j}^{(k-1)}, \\ \mathcal{N}_n^{(k)} &= \sum_{j=0}^M q_j (n + \beta + j \cdot k) \mathcal{N}_{n+j}^{(k-1)}, \\ \frac{\mathcal{Z}_n^{(k)}}{\mathcal{N}_n^{(k)}} &= \tilde{\mathcal{H}}_n^{(k)}(e_m, \beta, \{s_n\}, \{\omega_n\}). \end{aligned} \quad (5.72)$$

Man erkennt unschwer, daß der Algorithmus (5.24) ein Spezialfall des Algorithmus (5.72) ist. Dies stützt sich auf die Beziehungen $M = 2$, $e_1 = \exp(i\alpha)$ und $e_2 = \exp(-i\alpha)$, die $q_0 = q_2 = 1$ und $q_1 = -2 \cos(\alpha)$ implizieren.

5.2 Iterative Algorithmen für Fourier-Reihen

5.2.1 Hierarchisch konsistente Herleitung

In diesem Abschnitt wird eine nichtlineare Folgentransformation vorgestellt, die für Fourier-Reihen geeignet ist. Diese Transformation wird durch Iteration einer einfachen Fol-

gentransformation gewonnen. Hierzu wird die Transformation

$$s_n^{(1)} = \frac{\frac{s_{n+2}}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{s_{n+1}}{\omega_{n+1}} + \frac{s_n}{\omega_n}}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}} \quad (5.73)$$

verwendet, die die niedrigste Ordnung der \mathcal{H} -Transformation darstellt. Sie ist exakt für die Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n (c_0 \exp(i\alpha n) + d_0 \exp(-i\alpha n)) = s + \omega_n (\gamma_0 \cos(\alpha n) + \delta_0 \sin(\alpha n)) . \quad (5.74)$$

Man vergleiche Gl. (5.4). Außerdem beachte man, daß im Zähler und im Nenner von Gl. (5.73) die Koeffizienten der Rekursion

$$v_{n+2} - 2 \cos(\alpha) v_{n+1} + v_n = 0 \quad (5.75)$$

auftreten, deren allgemeine Lösung

$$v_n = A \cos(n\alpha) + B \sin(n\alpha) \quad (5.76)$$

als Linearkombination von Sinus- und Kosinusfunktionen dargestellt werden kann.

Die Iteration der einfachen Folgentransformation (5.73) soll in einer hierarchisch konsistenten Weise vorgenommen werden. Dazu muß die einfache Folgentransformation auf eine kompliziertere Modellfolge angewandt werden, die in der Hierarchie höher steht. Eine einfache Verallgemeinerung ist

$$s_n = s + \omega_n \left(\exp(i\alpha n) \left\{ c_0 + \frac{c_1}{n + \beta} \right\} + \exp(-i\alpha n) \left\{ d_0 + \frac{d_1}{n + \beta} \right\} \right) , \quad (5.77)$$

die man als Gl. (5.4) für $k = 2$ identifizieren kann.

Wir wenden also die Transformation (5.73) auf die Modellfolge (5.77) an. Ziel ist es, die transformierte Folge $s_n^{(1)}$ zumindest asymptotisch für große n in die Form der Gl. (5.74) zu bringen, allerdings mit renormierten Werten von ω_n , c_0 und d_0 . Da c_0 und d_0 sowieso nur freie Parameter sind, kann man dann neue Werte von ω_n ablesen, die für die nächste Stufe der Iteration zu verwenden sind.

Bei Verfolgung dieses Programmes erhält man ausgehend von Gln. (5.73) und (5.77)

$$\begin{aligned} s_n^{(1)} - s = & \\ & \frac{e^{i\alpha(n+1)} c_1}{n + \beta + 1} \frac{e^{-i\alpha} \frac{n + \beta + 1}{n + \beta} - 2 \cos(\alpha) + e^{i\alpha} \frac{n + \beta + 1}{n + \beta + 2}}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}} \\ & + \frac{e^{-i\alpha(n+1)} d_1}{n + \beta + 1} \frac{e^{i\alpha} \frac{n + \beta + 1}{n + \beta} - 2 \cos(\alpha) + e^{-i\alpha} \frac{n + \beta + 1}{n + \beta + 2}}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}} . \end{aligned} \quad (5.78)$$

Einfache Algebra liefert die asymptotische Beziehung

$$\begin{aligned} & \exp(i(\pm\alpha)) \frac{n + \beta + 1}{n + \beta} - 2 \cos(\alpha) + \exp(-i(\pm\alpha)) \frac{n + \beta + 1}{n + \beta + 2} \\ &= \frac{\pm 2i \sin \alpha}{n + \beta + 1} + O((n + \beta + 1)^{-2}) \end{aligned} \quad (5.79)$$

für große n . Verwendung in Gl. (5.78) ergibt

$$\begin{aligned} s_n^{(1)} &\approx s + \frac{1}{(n + \beta + 1)^2 \left(\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n} \right)} \\ &\times (\exp(i\alpha(n + 1))c_1(-2i \sin \alpha) + \exp(-i\alpha(n + 1))d_1(+2i \sin \alpha)) . \end{aligned} \quad (5.80)$$

Dies ist tatsächlich von der Form (5.74) wenn man als neue Werte von ω_n

$$\omega_n^{(1)} = (n + \beta + 1)^{-2} \left(\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n} \right)^{-1} \quad (5.81)$$

für $n = 0, 1, \dots$ wählt. Die renormierten Werte von c_0 und d_0 ergeben sich dabei zu

$$c_0^{(1)} = \exp(i\alpha)(-2i \sin \alpha) c_1, \quad d_0^{(1)} = \exp(-i\alpha)(+2i \sin \alpha) d_1. \quad (5.82)$$

Durch hierarchisch konsistente Iteration ergibt sich also ein Algorithmus der Form

$$\begin{aligned} s_n^{(0)} &= s_n, \quad \omega_n^{(0)} = \omega_n \\ s_n^{(k+1)} &= \frac{\frac{s_{n+2}^{(k)}}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{s_{n+1}^{(k)}}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{s_n^{(k)}}{\omega_n^{(k)}}}{\frac{1}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{1}{\omega_n^{(k)}}} \\ \omega_n^{(k+1)} &= (n + \beta_k + 1)^{-2} \left(\frac{1}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{1}{\omega_n^{(k)}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (5.83)$$

Dies kann man verallgemeinern, indem man eine allgemeinere Hierarchie von Modellfolgen zugrundelegt.

Hierzu bietet sich die Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n (\exp(i\alpha n) \{c_0 + c_1 r_n\} + \exp(-i\alpha n) \{d_0 + d_1 r_n\}), \quad (5.84)$$

an. Verfährt man wieder in der oben beschriebenen Weise, so erhält man ausgehend von

Gln. (5.73) und (5.84)

$$\begin{aligned}
s_n^{(1)} - s = & \\
& e^{i\alpha(n+1)} c_1 \frac{e^{+i\alpha} r_{n+2} - 2 \cos(\alpha) r_{n+1} + e^{-i\alpha} r_n}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}} \\
& + e^{-i\alpha(n+1)} d_1 \frac{e^{-i\alpha} r_{n+2} - 2 \cos(\alpha) r_{n+1} + e^{i\alpha} r_n}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}}.
\end{aligned} \tag{5.85}$$

Einfache Algebra liefert die Beziehung

$$\begin{aligned}
& \exp(i(\pm\alpha)) r_{n+2} - 2 \cos(\alpha) r_{n+1} + \exp(-i(\pm\alpha)) r_n \\
& = \exp(i(\pm\alpha)) (r_{n+2} - r_{n+1}) + \exp(-i(\pm\alpha)) (r_n - r_{n+1}) \\
& = \pm 2i \Delta r_{n+1} \sin(\alpha) + O(\Delta^2 r_{n+1})
\end{aligned} \tag{5.86}$$

für große n . Verwendung in Gl. (5.85) ergibt

$$\begin{aligned}
s_n^{(1)} \approx s + \frac{\Delta r_{n+1}}{\left(\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n} \right)} \\
\times (\exp(i\alpha(n+1)) c_1 (2i \sin \alpha) + \exp(-i\alpha(n+1)) d_1 (-2i \sin \alpha)).
\end{aligned} \tag{5.87}$$

Dies ist tatsächlich von der Form (5.74) wenn man als neue Werte von ω_n

$$\omega_n^{(1)} = \frac{-\Delta r_{n+1}}{\frac{1}{\omega_{n+2}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}} + \frac{1}{\omega_n}} \tag{5.88}$$

für $n = 0, 1, \dots$ wählt. Die renormierten Werte von c_0 und d_0 ergeben sich wieder aus Gl. (5.82).

Durch hierarchisch konsistente Iteration ergibt sich also ein Algorithmus der Form

$$\begin{aligned}
s_n^{(0)} &= s_n, \quad \omega_n^{(0)} = \omega_n \\
s_n^{(k+1)} &= \frac{\frac{s_{n+2}^{(k)}}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{s_{n+1}^{(k)}}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{s_n^{(k)}}{\omega_n^{(k)}}}{\frac{1}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{1}{\omega_n^{(k)}}} \\
\omega_n^{(k+1)} &= \frac{-\Delta r_{n+1}^{(k)}}{\frac{1}{\omega_{n+2}^{(k)}} - 2 \cos(\alpha) \frac{1}{\omega_{n+1}^{(k)}} + \frac{1}{\omega_n^{(k)}}}
\end{aligned} \tag{5.89}$$

Diese Transformation nennen wir die \mathcal{I} -Transformation und setzen

$$\mathcal{I}_n^{(k)}(\alpha, \{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) = s_n^{(k)} \quad (5.90)$$

5.2.2 Alternative Algorithmen

Ähnlich wie bei der \mathcal{J} -Transformation kann man auch bei der \mathcal{I} -Transformation einen alternativen Algorithmus zur Berechnung angeben. Dazu setzen wir

$$s_n^{(k)} = N_n^{(k)} / D_n^{(k)}, \quad D_n^{(k)} = 1 / \omega_n^{(k)}. \quad (5.91)$$

Dann kann man die \mathcal{I} -Transformation auch mittels des folgenden Algorithmus berechnen:

$$\begin{aligned} N_n^{(0)} &= s_n / \omega_n, \quad D_n^{(0)} = 1 / \omega_n, \\ N_n^{(k+1)} &= \left(N_{n+2}^{(k)} - 2 \cos(\alpha) N_{n+1}^{(k)} + N_n^{(k)} \right) / \delta_n^{(k)} \\ D_n^{(k+1)} &= \left(D_{n+2}^{(k)} - 2 \cos(\alpha) D_{n+1}^{(k)} + D_n^{(k)} \right) / \delta_n^{(k)} \\ \mathcal{I}_n^{(k)}(\alpha, \{s_n\}, \{\omega_n\}, \{r_n^{(k)}\}) &= N_n^{(k)} / D_n^{(k)} \end{aligned} \quad (5.92)$$

mit $\delta_n^{(k)} = -\Delta r_{n+1}^{(k)}$. Dies zeigt, daß die \mathcal{I} -Transformation in der hier eingeführten Form eine Verallgemeinerung der Transformation

$$\begin{aligned} N_n^{(0)} &= s_n / \omega_n, \quad D_n^{(0)} = 1 / \omega_n, \\ N_n^{(k+1)} &= (n + \beta)^\gamma \left(N_{n+2}^{(k)} - 2 \cos(\alpha) N_{n+1}^{(k)} + N_n^{(k)} \right), \\ D_n^{(k+1)} &= (n + \beta)^\gamma \left(D_{n+2}^{(k)} - 2 \cos(\alpha) D_{n+1}^{(k)} + D_n^{(k)} \right), \\ \mathcal{I}_n^{(k)}(\alpha, \beta, \gamma, \{s_n\}, \{\omega_n\}) &= N_n^{(k)} / D_n^{(k)} \end{aligned} \quad (5.93)$$

ist. Um das einzusehen, muß man nur die Ersetzung $\delta_n^{(k)} = (n + \beta)^{-\gamma}$ vorzunehmen. Die Transformation (5.93) wurde in [162] eingeführt und dort als \mathcal{H} -Transformation bezeichnet.

5.2.3 Numerische Tests

Es werden jetzt einige numerische Testergebnisse präsentiert, die zeigen, daß die iterative \mathcal{I} -Transformation ähnlich gute Resultate liefern kann wie die \mathcal{H} -Transformation.

In den Tabellen 5.4-5.6 werden die \mathcal{H} -Transformation und verschiedene Varianten der \mathcal{I} -Transformation, die ja ein Spezialfall der \mathcal{I} -Transformation ist, auf die Fourier-Reihen der 2π -periodischen (vom Intervall $(-\pi, \pi)$ periodisch fortgesetzten) Funktionen $f_1(\alpha) = \alpha^2$, $f_2(\alpha) = 1 + \alpha$ und $f_3(\alpha) = \exp(\alpha)$ angewandt. Die Fourier-Reihe von $f_1(\alpha)$ auf $(-\pi, \pi)$ ist gegeben durch

$$s = \pi^2/3 + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^2} \cos(n\alpha). \quad (5.94)$$

Die Fourier-Reihe von $f_2(\alpha)$ ist in Gl. (5.60), die von $f_3(\alpha)$ in Gl. (5.59) gegeben. Für alle Extrapolationsverfahren wurde die Restabschätzung ω_n aus Gl. (5.61) verwandt. Die

Rechnungen wurden in FORTRAN 77 DOUBLE PRECISION durchgeführt, was auf dem verwendeten Computer einer Maschinengenauigkeit von 15-16 Stellen entspricht.

In allen diesen Fällen schneiden die untersuchten Verfahren ziemlich ähnlich ab. Die Variation von β und γ für die \mathcal{I} -Transformation hat keinen entscheidenden Einfluß. Der Wert $\gamma = 2$, den man aufgrund von Gln. (5.83) und (5.93) erwartet, ist den anderen Werten von γ in diesen Beispielen überlegen. Die \mathcal{H} -Transformation bietet leichte Vorteile gegenüber den Varianten der \mathcal{I} -Transformation.

5.3 Die Behandlung von Sprungstellen und Singularitäten

5.3.1 Beschreibung der Methode

Wir haben im Zusammenhang mit Tabelle 5.3 gesehen, daß in der Nähe von Singularitäten der durch die Fourier-Reihen dargestellten Funktionen die Extrapolation durch nichtlineare Folgentransformationen anscheinend auf Schwierigkeiten stößt.

Dies wurde für den Fall der Reihe (5.110) auch von Boyd [41] untersucht. Es zeigte sich in diesen Untersuchungen, daß in der Nähe der Unstetigkeitsstellen sehr viele Standardverfahren sehr schlecht (z.B. Richardson-Extrapolation, Chebyshev-Verfahren) bis schlecht (u-Levin, ϵ -Algorithmus, Euler-Verfahren) abschnitten, wenn nur $\mu = 1 - |\alpha|/\pi$ genügend klein war. Diese Schwierigkeit kann man zu beheben versuchen, indem man die Fourier-Reihe als Summe von einem polynomialen Anteil und einer wesentlich glatteren Fourier-Reihe darstellt. Dabei kann man einen analytischen Ansatz wählen, bei dem man den polynomialen Anteil (im wesentlichen Bernoulli-Polynome) aus den höheren Ableitungen der Funktion an den Unstetigkeitsstellen bestimmt [24], oder indem man die Position und Natur der Unstetigkeitsstellen aus den Partialsummen der Fourier-Reihe numerisch berechnet [108].

Wir wollen einen anderen Ansatz vorstellen, bei dem man statt der ursprünglichen Fourier-Reihe eine eng verwandte Fourier-Reihe extrapoliert.

Betrachten wir dazu das Beispiel aus Gl. (5.62). Für $q = 1$ hat die Funktion Singularitäten für $1 = \exp(\pm ix)$, insbesondere also bei $x = 0$. Die Terme der Reihe sind für $q = 1$

$$A_j = \frac{1}{j} \cos(jx). \quad (5.95)$$

Sie oszillieren also als Funktion des Laufindex j für $x \neq 0$. Der erste Vorzeichenwechsel dieser Terme ist bei $j_0 = \pi/(2x)$. Ist x sehr klein, so ist j_0 sehr groß. Die Oszillationen der Terme als Funktion von j sind demnach sehr langsam. Die ersten Terme der Reihe sind numerisch von den Termen der divergenten Reihe

$$\sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{j} \quad (5.96)$$

für kleine x kaum zu unterscheiden.

Tabelle 5.4: Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \alpha^2$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
5	1.25	3.54	3.07	3.58	3.37	3.28
6	1.30	2.94	3.47	2.97	2.48	3.05
7	1.95	4.99	7.36	4.50	4.64	4.96
8	1.69	4.69	5.79	4.78	3.89	5.06
9	1.61	7.01	6.08	6.95	5.66	6.28
10	2.06	6.49	7.57	7.36	5.37	7.64
11	2.05	8.42	7.80	7.39	7.15	8.46
12	1.84	8.29	8.27	8.69	6.90	8.53
13	2.16	10.18	9.08	9.27	9.97	9.15
14	2.38	10.17	10.18	9.97	8.53	10.32
15	2.03	11.89	10.35	10.23	9.76	10.96
16	2.25	12.27	11.15	10.90	10.32	11.34
17	2.73	13.40	13.00	11.68	10.91	12.12
18	2.20	14.27	12.50	13.03	12.36	13.33
19	2.33	∞	13.10	13.04	12.46	13.42
20	3.24	15.65	14.70	13.64	13.56	14.21
21	2.36	∞	14.70	14.33	13.97	15.35
22	2.41	∞	15.18	15.00	14.31	15.26
23	3.80	∞	∞	15.18	14.81	15.95
24	2.51	∞	15.65	15.48	15.65	15.65
25	2.49	∞	15.95	15.48	15.48	15.65

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Tabelle 5.5: Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = 1 + \alpha$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 1$

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
5	1.16	3.49	3.67	3.33	3.08	3.42
6	1.65	3.30	3.99	3.32	2.83	3.42
7	1.14	6.88	4.94	5.23	4.48	5.50
8	1.28	4.90	7.41	5.12	4.13	5.28
9	2.21	7.07	7.38	6.15	5.97	6.75
10	1.32	6.58	7.15	7.10	5.52	7.08
11	1.37	9.38	7.84	8.15	8.40	8.09
12	2.69	8.33	10.12	8.54	6.99	8.76
13	1.46	10.47	9.32	9.17	8.49	10.48
14	1.44	10.18	9.96	9.69	8.53	10.33
15	2.16	12.40	11.02	10.37	9.73	10.87
16	1.60	12.10	11.48	12.14	10.14	12.39
17	1.50	13.88	11.95	11.77	11.34	12.44
18	2.00	13.99	13.03	12.41	11.57	13.00
19	1.74	15.18	13.69	13.11	12.61	13.96
20	1.56	15.65	14.03	14.39	12.82	14.63
21	1.91	15.65	14.95	14.91	13.43	14.95
22	1.90	∞	15.95	14.95	14.15	15.65
23	1.62	∞	∞	15.65	14.84	∞
24	1.87	∞	15.65	15.65	15.18	15.65
25	2.08	∞	15.65	15.65	15.35	∞

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Tabelle 5.6: Vergleich der \mathcal{H} - und der \mathcal{I} -Transformation für die Fourier-Reihe von $f(\alpha) = \exp(\alpha)$ im Intervall $-\pi < \alpha < \pi$ für $\alpha = 0.1$

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
5	0.66	2.83	2.92	2.75	2.58	2.79
6	0.61	2.27	2.76	2.30	1.85	2.37
7	0.59	4.27	4.64	4.19	3.80	4.34
8	0.58	3.87	4.78	3.98	3.19	4.14
9	0.58	6.09	7.52	5.93	5.11	6.28
10	0.59	5.60	7.12	5.80	4.61	6.12
11	0.60	8.27	10.11	8.24	6.56	8.62
12	0.61	7.44	9.42	7.78	6.10	8.25
13	0.63	10.01	10.97	11.97	8.18	10.58
14	0.65	9.33	12.11	9.85	7.66	10.49
15	0.67	11.77	12.81	11.62	9.98	13.08
16	0.70	11.28	14.52	11.86	9.28	12.89
17	0.72	14.30	14.66	14.25	11.86	15.40
18	0.76	13.30	15.09	14.30	10.96	15.22
19	0.79	15.40	15.22	15.40	13.26	15.40
20	0.83	15.09	15.70	15.40	12.66	15.40
21	0.88	15.70	15.22	15.22	14.52	15.70
22	0.92	15.40	15.22	15.40	14.32	15.22
23	0.98	15.22	15.22	15.22	15.09	15.22
24	1.04	15.40	15.09	15.09	15.09	15.09
25	1.11	15.22	15.22	15.09	15.22	15.09

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Um diese langwelligen Oszillationen in den Griff zu bekommen, kann man bei jeder Fourier-Reihe der Form

$$s = a_0/2 + \sum_{j=1}^{\infty} (a_j \cos(j\alpha) + b_j \sin(j\alpha)) \quad (5.97)$$

gemäß

$$s = a_0/2 + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\tau} \left(a_{k+(m-1)\tau} \cos([k + (m-1)\tau]\alpha) + b_{k+(m-1)\tau} \sin([k + (m-1)\tau]\alpha) \right) \quad (5.98)$$

jeweils τ aufeinanderfolgende Terme zusammenfassen. Man erhält so eine frequenzvervielfachte Fourier-Reihe der τ -fachen Grundfrequenz:

$$\begin{aligned} s &= a_0/2 + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\check{a}_m \cos(m\tau\alpha) + \check{b}_m \sin(m\tau\alpha) \right), \\ \check{a}_m &= \sum_{k=1}^{\tau} \left(a_{k+(m-1)\tau} \cos([k - \tau]\alpha) + b_{k+(m-1)\tau} \sin([k - \tau]\alpha) \right), \\ \check{b}_m &= \sum_{k=1}^{\tau} \left(-a_{k+(m-1)\tau} \sin([k - \tau]\alpha) + b_{k+(m-1)\tau} \cos([k - \tau]\alpha) \right). \end{aligned} \quad (5.99)$$

Die Partialsummen dieser frequenzvervielfachten Reihe sind

$$\check{s}_n = a_0/2 + \sum_{m=1}^n \left(\check{a}_m \cos(m\tau\alpha) + \check{b}_m \sin(m\tau\alpha) \right). \quad (5.100)$$

Es gilt

$$\check{s}_n = s_{n\tau}, \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (5.101)$$

Das heißt, daß die Beschleunigung der frequenzvervielfachten Reihe damit gleichbedeutend ist, daß man statt der Folge $\{s_0, s_1, s_2, \dots\}$ die Folge $\{s_0, s_\tau, s_{2\tau}, \dots\}$ extrapoliert. Dies kann man für jede natürliche Zahl τ machen. Allgemeiner kann man statt der Folge $\{s_0, s_1, s_2, \dots\}$ eine Folge $\{s_{R_0}, s_{R_1}, s_{R_2}, \dots\}$ betrachten, wobei die $\{R_l\}$ eine streng monoton wachsende Folge nicht-negativer ganzer Zahlen sind: $0 \leq R_0 < R_1 < R_2 \dots$. Man kann also zum Beispiel $R_l = \llbracket l\tau \rrbracket$ für *reelles* $\tau > 1$ setzen.

Wir bemerken, daß man für jede Reihe

$$s = \sum_{j=0}^{\infty} a_j \quad (5.102)$$

mit Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n a_j \quad (5.103)$$

durch Zusammenfassung der Terme eine neue Reihe

$$s = \sum_{j=0}^{\infty} \check{a}_j \quad (5.104)$$

mit Termen

$$\check{a}_0 = a_0, \quad \check{a}_j = \sum_{k=1}^{\tau} a_{k+(j-1)\tau} \quad (j > 0) \quad (5.105)$$

und Partialsummen

$$\check{s}_n = \sum_{j=0}^n \check{a}_j \quad (5.106)$$

definieren kann. Diese erfüllen ebenfalls $\check{s}_n = s_{\tau n}$.

Ähnliche Indextransformationen spielen eine Rolle bei den $d^{(m)}$ -Transformationen. Sidi hat gezeigt, daß die $d^{(1)}$ -Transformation mit $R_l = \tau l$ für $\tau \in \mathbb{N}$ durch geeignete Wahl von τ numerisch stabilisiert werden kann und auch noch in der Nähe von Singularitäten zu guten Ergebnissen führt [323]. Die $d^{(1)}$ -Transformation mit $R_l = \tau l$ für $\tau \in \mathbb{N}$ ist aber nichts anderes als die Transformation (vgl. [323, Gl. 4.12])

$$W_{\nu}^{(n)} = \frac{\Delta^{\nu+1} \left[(n + \beta/\tau)^{\nu-1} s_{\tau n} / (s_{\tau n} - s_{(\tau n)-1}) \right]}{\Delta^{\nu+1} \left[(n + \beta/\tau)^{\nu-1} / (s_{\tau n} - s_{(\tau n)-1}) \right]} \quad (5.107)$$

also identisch der Levin-Transformation, angewandt auf die Folge $\{s_0, s_{\tau}, s_{2\tau}, \dots\}$, mit den Restabschätzungen $\omega_n = (n + \beta/\tau)(s_{\tau n} - s_{(\tau n)-1})$,

$$W_{\nu-1}^{(n)} = \mathcal{L}_{\nu}^{(n)}(\beta/\tau, s_{\tau n}, (n + \beta/\tau)(s_{\tau n} - s_{\tau n-1})). \quad (5.108)$$

Dies ist für $\tau \neq 1$ nicht identisch mit der Anwendung der u -Levin-Transformation auf die Partialsummen $\{s_0, s_{\tau}, s_{2\tau}, \dots\}$, da in diesem Falle als Restabschätzung $\omega_n = (n + \beta')(s_{\tau n} - s_{\tau(n-1)})$ verwendet würde.

Ähnlich operiert die $d^{(m)}$ -Transformationen im allgemeinen auf den Partialsummen $\{s_0, s_{\tau}, s_{2\tau}, \dots\}$ und den entsprechenden Termen der Reihe.

Als wichtiger Sachverhalt sei hier vermerkt, daß man jede Levin-artige Transformation in dieser Weise verwenden kann. Das heißt, das man als Input die Folge $\{\check{s}_0, \check{s}_1, \dots\} = \{s_0, s_{\tau}, s_{2\tau}, \dots\}$ und die Restabschätzungen $\omega_n = (n + \beta/\tau)(s_{\tau n} - s_{\tau n-1})$ verwendet. Da die Levin-artigen Transformationen im allgemeinen multiplikativ invariant in ω_n sind, kann man auch $\omega_n = (\tau n + \beta)(s_{\tau n} - s_{\tau n-1})$ verwenden. Diese Beobachtung erweitert wahrscheinlich den Anwendungsbereich der Weniger-Transformation \mathcal{S} und der \mathcal{J} -Transformationen erheblich.

Es liegt also nahe, die \mathcal{H} - und \mathcal{I} -Transformationen in ähnlicher Weise anzuwenden. Wie wir sehen werden, wird dadurch der Anwendungsbereich bis hin zu den problematischen Fällen in der Nähe von Sprungstellen und Singularitäten vergrößert. Ferner kann man so die numerische Stabilität der Transformationen erhöhen, wenn mehr Terme der Reihe zur Verfügung stehen.

Für die Anwendung der \mathcal{H} - und \mathcal{I} -Transformationen auf die frequenzvervielfachte Reihe zu gegebenem τ verwendet man dabei einen Frequenzparameter $\tau\alpha$, was sich aufgrund von Gl. (5.99) anbietet, und Restabschätzungen

$$\omega_n = (\tau n + \beta)\mu(a_{\tau n}, b_{\tau n}). \quad (5.109)$$

Der Preis für die Extrapolationsmöglichkeit auch in der Nähe von Unstetigkeiten und Singularitäten besteht bei dem beschriebenen Verfahren also darin, daß man relativ viele Terme der Fourier-Reihe benötigt, da τ je größer gewählt werden muß, je näher man der Singularität kommt.

5.3.2 Numerische Beispiele

Wir wenden dieses Verfahren der Frequenzvervielfachung auf die Fourier-Reihe

$$s = 2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{(-1)^{j+1}}{j} \sin(j\alpha) \quad (5.110)$$

der vom Intervall $(-\pi, \pi)$ periodisch fortgesetzten Funktion $f(\alpha) = \alpha$ an. Die Partialsummen sind durch

$$s_n = 2 \sum_{j=1}^{n+1} \frac{(-1)^{j+1}}{j} \sin(j\alpha), \quad (n \in \mathbb{N}_0) \quad (5.111)$$

gegeben. Die Funktion (5.110) hat für alle $\alpha = (2k + 1)\pi$ mit $k \in \mathbb{Z}$ eine Sprungstelle, insbesondere also für $\alpha = \pi$.

In den Tabellen 5.7-5.10 werden zwei verschiedene Werte von α in der Nähe dieser Sprungstelle betrachtet. In den Tabellen 5.7 und 5.8 ist $\alpha = 9\pi/10$ gewählt, in den Tabellen 5.9 und 5.10 wird der Punkt $\alpha = 99\pi/100$ in der unmittelbaren Nachbarschaft betrachtet. In den Tabellen wird die \mathcal{H} -Transformation mit verschiedenen Varianten der \mathcal{I} -Transformation hinsichtlich der erzielbaren Zahl exakter Stellen verglichen. Es stehen jeweils Werte in einer Zeile, die aus gleichvielen Termen der ursprünglichen Fourier-Reihe berechnet wurden. Die Rechnungen wurden in FORTRAN DOUBLE PRECISION durchgeführt, was auf dem verwendeter Rechner etwa 14-16 Dezimalstellen entspricht.

In Tabelle 5.7 wird die Fourier-Reihe direkt beschleunigt. Es zeigt sich, daß so für $\alpha = 9\pi/10$, also relativ dicht an der Sprungstelle, bestenfalls etwa fünf exakte Stellen erhalten werden können, bevor für größere n die Genauigkeit wieder sinkt. Alle Verfahren sind numerisch empfindlich, was sich darin manifestiert, daß für $n > 36$ alle extrapolierten Werte ungenauer sind als die Partialsummen der Reihe selbst. Die Varianten der \mathcal{I} -Transformation sind offensichtlich numerisch stabiler als die \mathcal{H} -Transformation, was letztendlich für dieses schwierige Beispiel zu einer höheren erreichbaren Stellenzahl führt.

In Tabelle 5.8 wird die frequenzvervielfachte Fourier-Reihe mit $\tau = 5$ verwendet. Man erkennt, daß nun die Extrapolationsverfahren in etwa Maschinengenauigkeit für $n \geq 30$ liefert. Für $\tau = 5$ bedeutet $n = 30$, daß Partialsummen bis s_{150} zur Extrapolation verwendet wurden. Außerdem ist klar ersichtlich, daß für größere n die Genauigkeit wesentlich

Tabelle 5.7: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.110) für $\alpha = 9\pi/10$ (14-16 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	0.92	0.11	0.34	0.14	0.11	0.17
9	0.71	0.86	1.82	2.30	1.97	1.85
12	1.01	0.36	2.55	1.19	0.12	2.48
15	1.41	1.75	3.34	2.98	2.34	3.36
18	0.97	1.81	4.01	4.48	0.24	4.11
21	1.11	2.63	4.77	4.40	3.76	4.85
24	2.46	1.41	4.79	3.44	1.39	4.64
27	1.18	0.14	3.76	1.96	-0.14	3.57
30	1.18	-0.38	3.05	0.70	-1.91	2.84
33	1.80	-0.43	1.48	-0.12	-1.80	1.34
36	1.41	0.61	-0.19	-0.45	-1.32	-0.30
39	1.26	-0.56	-0.80	-0.59	-1.33	-2.30
42	1.57	-0.64	-1.23	-1.21	-1.40	-1.86
45	1.72	-1.28	-1.74	-0.82	-1.84	-1.92
48	1.35	-0.18	-1.36	-1.37	-1.90	-1.88

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

weniger schnell abnimmt als für den in Tabelle 5.7 betrachteten Fall. Die höhere Frequenz der frequenzvervielfachten Reihe hat also die Extrapolationsverfahren auch numerisch stabilisiert.

In Tabelle 5.9 wird die Fourier-Reihe für $\alpha = 99\pi/100$ direkt beschleunigt. Es zeigt sich, daß für diesen Wert von α unmittelbar in der Nähe der Sprungstelle bestenfalls etwa eine exakte Stelle erhalten werden kann, bevor schon für mittlere n die Genauigkeit rapide sinkt, und numerische Instabilitäten jeglichen Beschleunigungseffekt zunichte machen. Geeignete Varianten der \mathcal{I} -Transformation stellen sich auch hier als numerisch stabiler als die \mathcal{H} -Transformation heraus.

Tabelle 5.8: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 5$ zur Reihe (5.110) für $\alpha = 9\pi/10$ (14-16 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
30	6	1.18	1.94	2.50	2.08	1.50	2.09
45	9	1.72	5.39	4.65	4.46	4.26	5.36
60	12	1.48	6.22	6.51	6.54	4.74	6.65
75	15	1.91	9.04	10.09	7.62	7.46	8.49
90	18	1.65	11.27	10.24	9.48	9.56	10.47
105	21	2.04	12.80	11.84	10.95	9.90	12.55
120	24	1.78	14.63	13.32	12.63	11.45	13.63
135	27	2.14	15.33	14.80	14.29	13.50	15.33
150	30	1.87	15.50	15.10	15.03	14.34	15.20
165	33	2.23	15.20	15.50	15.80	∞	15.80
180	36	1.95	15.80	15.33	15.80	15.10	15.80
195	39	2.30	15.33	15.50	15.50	15.33	∞
210	42	2.02	15.50	15.33	15.80	15.10	15.80
225	45	2.36	15.33	15.20	15.80	15.20	15.03
240	48	2.08	15.10	15.33	15.10	15.33	15.20

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet. Es wurden $m + 1$ Terme der Fourier-Reihe und $n + 1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

In Tabelle 5.10 wird die frequenzvervielfachte Fourier-Reihe mit $\tau = 50$ verwendet. Man erkennt, daß nun die Extrapolationsverfahren in etwa Maschinengenauigkeit für $n \geq 30$ liefert. Für $\tau = 50$ bedeutet $n = 30$ allerdings, daß Partialsummen bis s_{1500} zur Extrapolation verwendet wurden. Für größere n bleibt die Genauigkeit im wesentlichen erhalten, was sich deutlich vom Fall der direkten Anwendung auf die Fourier-Reihe in Tabelle 5.9 unterscheidet. Die Unterdrückung der langwelligen Oszillationen führt also wieder zur Stabilisierung der Extrapolationsverfahren.

Als Faustformel kann man diesen Beispielen entnehmen, daß für zehnfach kleineren

Tabelle 5.9: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.110) für $\alpha = 99\pi/100$ (14-16 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	0.07	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
9	0.10	-0.80	2.37	0.95	-0.62	1.15
12	0.13	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
15	0.17	-0.08	1.06	0.77	-0.97	1.02
18	0.20	0.01	0.92	0.01	0.01	0.03
21	0.25	-0.13	0.22	-2.40	-4.14	-0.33
24	0.29	-1.10	-2.89	-2.08	0.01	-2.92
27	0.34	-1.00	-3.22	-2.28	-3.05	-2.72
30	0.39	-0.27	-2.65	-2.81	-2.67	-2.52
33	0.45	-0.59	-3.44	-2.27	-3.69	-4.06
36	0.51	-0.40	-3.16	-2.26	-3.32	-4.70
39	0.58	0.15	-3.50	-1.52	-3.14	-3.55
42	0.66	0.44	-4.88	-2.91	-3.14	-3.61
45	0.76	0.66	-3.80	-3.93	-4.24	-3.70
48	0.87	-0.46	-3.83	-3.40	-3.76	-4.41

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Abstand zur Singularität eine zehnfach größerer Wert von τ für vergleichbare Ergebnisse benötigt wird.

Als ein weiteres Beispiel betrachten wir die Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ mit Singularität bei $\alpha = 0$ und verschiedenen Werte von α . An diesem Beispiel soll untersucht werden, wie die Stellenzahl der Rechnung sich auf die Qualität der Resultate auswirkt. Dazu wurden bestimmte Rechnungen in FORTRAN QUADRUPLE PRECISION durchgeführt, was etwa 32-34 Dezimalstellen auf dem verwendeten Computer entspricht (Tabellen 5.11 – 5.19). Die Rechnungen wurden dann in FORTRAN DOUBLE PRECISION wiederholt, was etwa 14-15 Dezimalstellen entspricht (Tabellen 5.20 – 5.28). Jeder Tabelle

Tabelle 5.10: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 50$ zur Reihe (5.110) für $\alpha = 99\pi/100$ (14-16 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
300	6	1.18	0.78	1.34	0.85	0.45	0.91
450	9	3.00	5.46	4.76	4.68	3.99	5.24
600	12	1.47	4.94	6.51	5.48	3.57	5.90
750	15	3.86	9.14	8.90	7.73	7.31	8.51
900	18	1.64	10.00	10.36	9.56	7.59	10.50
1050	21	3.48	12.85	11.72	11.02	9.99	12.51
1200	24	1.77	15.24	13.34	12.70	11.61	13.71
1350	27	3.45	14.77	15.00	14.52	13.77	14.85
1500	30	1.87	14.73	14.67	15.15	14.21	14.80
1650	33	3.46	14.89	14.80	14.85	14.80	14.85
1800	36	1.94	14.70	14.77	15.00	14.80	14.73
1950	39	3.49	14.89	14.94	14.80	14.77	14.77
2100	42	2.01	14.94	14.94	15.00	14.85	14.73
2250	45	3.52	14.85	14.77	14.77	14.80	14.89
2400	48	2.07	14.94	14.77	14.77	14.94	14.70

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

mit QUADRUPLE PRECISION wird zum Vergleich eine Tabelle mit DOUBLE PRECISION zugeordnet: Tabelle 5.11 entspricht Tabelle 5.20, Tabelle 5.12 entspricht Tabelle 5.21, ..., Tabelle 5.19 entspricht Tabelle 5.28.

Diese relativ große Anzahl von Tabellen ist nötig, um Literaturergebnisse diskutieren zu können. Sidi hat ebenfalls die Fourier-Reihe (5.62) betrachtet und dabei die $d^{(2)}$ -Transformation sowie die \mathcal{H} -Transformation auf die reelle Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ angewandt [323, Tabellen 1 – 3]. Außerdem wandte er dort die $d^{(1)}$ -Transformation auf komplexe Reihen an, die dieser reellen Fourier-Reihe zugeordnet sind. Verfahren auf der Grundlage

komplexer Reihen werden später diskutiert.

Die Resultate in QUADRUPLE PRECISION in den Tabellen 5.11 – 5.19 sind vergleichbar mit Resultaten von Sidi, da bewußt die gleichen Werte von q und α gewählt wurden. Es sei bemerkt, daß die Darstellung in [323, Tabellen 1 – 3] die Zahl effektiv verwendeter Terme der Fourier-Reihe etwas verschleiert, da dort im Gegensatz zur vorliegenden Arbeit jede Zeile Extrapolationsergebnisse nebeneinanderstellt, die mit höchst unterschiedlicher Zahl von Termen erzielt wurden. Außerdem hat Sidi anscheinend nicht erkannt, daß es ebenso möglich ist, die \mathcal{H} -Transformation auf frequenzvervielfachte Reihen anzuwenden wie im Falle der $d^{(m)}$ -Transformationen, obwohl er die $d^{(m)}$ -Transformationen mit $R_l = \tau l$ verwandte. Daher kam Sidi [323] zu der Schlussfolgerung, daß in der Nähe von Singularitäten die \mathcal{H} -Transformation nicht brauchbar wäre. Diese Schlussfolgerung ist angesichts der Daten in den Tabellen 5.11 – 5.28 nicht haltbar. Richtig angewandt liefert die \mathcal{H} -Transformation für dieses Beispiel Resultate, die denen der vergleichbaren $d^{(2)}$ -Transformation mindestens ebenbürtig sind.

In den Tabellen 5.11 – 5.13 und 5.20 – 5.22 wird wie in [323, Tab. 1] der Wert $\alpha = \pi/3.1$ verwendet. Dieser Wert von α ist relativ weit von der Singularität bei $\alpha = 0$ entfernt. Folgerichtig liefert bereits Extrapolation der Fourier-Reihe selbst sowohl mit der \mathcal{H} - als auch mit der \mathcal{I} -Transformation zu $\gamma = 2$ relativ gute Resultate. Tabelle 5.11 entnimmt man, daß in QUADRUPLE PRECISION mit den ersten 50 Partialsummen ungefähr 20 exakte Dezimalstellen erreicht werden können, während in DOUBLE PRECISION 10-11 Dezimalstellen für $n = 30$ erreicht werden können, wonach die Genauigkeit deutlich sinkt, wie man Tabelle 5.20 entnimmt. Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 2$ verbessert dies im Falle von QUADRUPLE PRECISION fast auf Maschinengenauigkeit, wozu allerdings die ersten 100 Partialsummen der ursprünglichen Fourier-Reihe benötigt werden (Tabelle 5.12), während die ersten 50 Partialsummen dieser Reihe im Falle von DOUBLE PRECISION vierzehnstellige (Maschinen)genauigkeit erzielen lassen (Tabelle 5.21). Auch im Falle der Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 3$ benötigt man zur Erzielung der jeweiligen Maschinengenauigkeit im Falle von QUADRUPLE PRECISION die ersten etwa $m = 100$ Partialsummen (30 Stellen, Tabelle 5.13), und im Falle von DOUBLE PRECISION die ersten etwa $m = 50$ Partialsummen (14 Stellen, Tabelle 5.22).

Nach Beschleunigung konvergiert zwar die frequenzvervielfachte Reihe mit $\tau = 3$ schneller als die zu $\tau = 2$, wie man beispielsweise durch Vergleich der Zeilen mit $n = 15$ in den Tabellen 5.12 und 5.13 sieht. Dies wird jedoch bezogen auf die Zahl m der Partialsummen der ursprünglichen Fourier-Reihe dadurch wieder aufgewogen, daß man zur Berechnung der frequenzvervielfachten Reihe mit $\tau = 3$ anderthalbmal so viele Terme der ursprünglichen Reihe benötigt wie im Falle von $\tau = 2$.

Der relative Fehler beträgt bei Anwendung der $d^{(2)}$ -Transformation mit $R_l = l$ bei einer Maschinengenauigkeit von etwa 33 Stellen laut [323, Tab. 1] bei Verwendung von 50 Termen der Reihe $1.7 \cdot 10^{-20}$. Dies ist fast identisch mit dem entsprechenden Wert aus Tabelle 5.11 für die \mathcal{H} -Transformation bei Anwendung auf die Reihe selbst.

In den Tabellen 5.14 – 5.16 und 5.23 – 5.25 wird wie in [323, Tab. 2] der Wert $\alpha = \pi/6.1$ verwendet. Dieser Wert von α ist deutlich dichter bei der Singularität bei $\alpha = 0$. Dement-

Tabelle 5.11: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3$.1 (32-34 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	-0.62	0.61	1.52	0.79	1.30	1.48
9	-0.47	2.62	1.79	2.01	2.99	2.03
12	-0.34	3.67	2.99	3.00	3.14	3.64
15	-0.23	4.68	4.90	4.13	4.09	5.17
18	-0.13	5.90	6.35	5.77	4.98	6.99
21	-0.03	8.87	7.68	7.35	6.13	7.59
24	0.07	9.22	8.85	7.92	6.94	9.35
27	0.18	10.00	10.16	9.61	8.38	10.26
30	0.30	11.19	11.18	10.98	9.05	11.74
33	0.43	13.50	13.23	12.43	10.19	13.13
36	0.59	15.13	14.17	13.20	11.16	14.52
39	0.82	15.32	16.35	14.52	12.41	15.77
42	1.19	16.50	16.77	15.82	13.37	17.12
45	1.84	18.48	19.19	17.30	14.51	18.50
48	1.08	20.12	19.35	18.18	15.59	19.73

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

sprechend erhält man bei Extrapolation der Fourier-Reihe selbst sowohl mit der \mathcal{H} - als auch mit der \mathcal{I} -Transformation etwas schlechtere Resultate als für $\alpha = \pi/3$.1. Tabelle 5.14 zeigt, daß in QUADRUPLE PRECISION mit den ersten 50 Partialsummen ungefähr 15 exakte Dezimalstellen im Falle der \mathcal{I} -Transformation und etwa 10 Stellen im Fall der \mathcal{H} -Transformation erreicht werden können. In DOUBLE PRECISION können laut Tabelle 5.23 sieben Dezimalstellen für $n = 21$ im Falle der \mathcal{I} -Transformation und fünf Stellen für $n = 24$ im Falle der \mathcal{H} -Transformation erreicht werden, wobei die Genauigkeit für größere n wieder deutlich sinkt. Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 2$ verbessert dies im Falle von QUADRUPLE PRECISION auf etwa 21 Stellen, wozu allerdings

Tabelle 5.12: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
12	6	-0.34	2.67	2.95	2.04	2.55	2.44
18	9	-0.13	4.79	4.68	3.66	3.35	4.36
24	12	0.07	7.31	5.78	5.99	6.07	7.20
30	15	0.30	9.78	7.52	7.38	6.93	9.19
36	18	0.59	12.24	9.43	9.41	9.25	10.55
42	21	1.19	14.61	11.47	11.25	10.19	12.60
48	24	1.08	17.31	14.53	12.85	12.85	16.99
54	27	0.71	18.81	15.40	14.97	13.76	16.35
60	30	0.55	21.39	17.08	16.92	16.06	18.08
66	33	0.47	23.46	19.02	18.91	17.03	19.99
72	36	0.43	26.00	21.50	20.95	20.10	22.41
78	39	0.41	28.48	23.01	22.12	20.59	24.14
84	42	0.41	30.99	24.55	24.24	22.81	25.62
90	45	0.42	32.55	26.39	26.76	23.88	27.44
96	48	0.46	32.72	28.47	27.99	26.70	29.49

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

die ersten 100 Partialsummen der ursprünglichen Fourier-Reihe benötigt werden (Tabelle 5.15). Im Falle von DOUBLE PRECISION kann man durch Frequenzverdoppelung etwa 11-12 exakte Stellen erzielen, wobei die ersten 50-60 Partialsummen der ursprünglichen Reihe benötigt werden (Tabelle 5.24). Mehr Stellen kann man bei Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 3$ erzielen: Im Falle von QUADRUPLE PRECISION liefern die ersten etwa $m = 150$ Partialsummen 30 Stellen bei Verwendung der \mathcal{H} - und etwa 28 Stellen bei Verwendung der \mathcal{I} -Transformation, wie Tabelle 5.16) zeigt. Im Falle von DOUBLE PRECISION liefern die ersten etwa 70 – 80 Partialsummen der ursprünglichen

Tabelle 5.13: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
18	6	-0.13	4.06	4.45	3.76	2.66	3.56
27	9	0.18	6.90	6.53	6.15	5.39	6.91
36	12	0.59	9.58	9.66	8.67	7.70	10.39
45	15	1.84	12.62	12.40	11.45	10.00	13.03
54	18	0.71	15.20	15.28	13.91	12.12	16.34
63	21	0.51	18.03	18.51	16.95	14.50	18.75
72	24	0.43	21.39	21.05	19.30	17.13	21.73
81	27	0.40	23.49	24.80	22.96	19.61	24.82
90	30	0.42	26.38	26.97	25.19	21.14	27.45
99	33	0.48	29.02	29.97	27.26	23.50	30.92
108	36	0.57	31.58	33.09	29.96	26.71	32.72
117	39	0.73	33.09	33.52	32.19	28.89	33.30
126	42	0.98	34.00	34.00	33.70	30.18	33.70
135	45	1.62	34.00	33.09	33.70	32.63	33.00
144	48	1.31	33.09	32.92	32.95	33.22	32.74

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet. Es wurden $m + 1$ Terme der Fourier-Reihe und $n + 1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $I_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Reihe sogar Maschinengenauigkeit (14 Stellen, Tabelle 5.25).

Nach Beschleunigung konvergiert wieder die frequenzvervielfachte Reihe mit $\tau = 3$ schneller als die zu $\tau = 2$, wie man beispielsweise durch Vergleich der Zeilen mit $n = 15$ in den Tabellen 5.15) und 5.16) sieht. Hundert Terme der ursprünglichen Reihe liefert allerdings in beiden Fällen etwa gleiche Genauigkeit. Die Extrapolation auf der Basis der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 3$ ist allerdings numerisch stabiler als die zu $\tau = 2$, da man im letzteren Fall in DOUBLE PRECISION keine Maschinengenauigkeit erzielen kann.

Tabelle 5.14: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	0.75	0.76	1.06	1.21	0.70	1.16
9	0.64	2.75	2.11	2.53	2.55	2.20
12	0.97	2.53	2.96	2.72	3.38	3.18
15	0.83	3.37	3.99	4.25	3.05	4.28
18	1.13	4.69	5.26	4.49	3.58	6.27
21	0.95	4.62	7.30	5.75	4.69	6.39
24	1.27	5.36	7.03	6.31	5.27	7.01
27	1.04	5.99	7.83	7.41	6.25	7.94
30	1.39	6.61	8.74	8.13	6.82	9.05
33	1.12	7.43	9.82	9.09	7.37	10.37
36	1.51	7.97	11.37	9.97	7.97	11.22
39	1.18	8.91	12.12	10.79	9.14	11.88
42	1.62	9.41	12.64	11.87	9.82	12.72
45	1.23	10.45	13.52	12.53	10.53	13.73
48	1.73	10.90	14.54	13.83	11.09	15.03

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Der relative Fehler beträgt bei Anwendung der $d^{(2)}$ -Transformation mit $R_l = 2l$ bei einer Maschinengenauigkeit von etwa 33 Stellen laut [323, Tab. 2] bei Verwendung von 98 Termen der reellen Fourier-Reihe $1.5 \cdot 10^{-21}$. Dies ist geringfügig schlechter als der Wert zu $m = 96$ aus Tabelle 5.15 für die \mathcal{H} -Transformation bei Anwendung auf die frequenzvervielfachte Reihe zu $\tau = 2$.

In den Tabellen 5.17 – 5.19 und 5.26 – 5.28 wird wie in [323, Tab. 3] der Wert $\alpha = \pi/50.1$ verwendet. Dieser Wert von α liegt sehr dicht an der Singularität bei $\alpha = 0$. Dementsprechende erhält man bei Extrapolation der Fourier-Reihe in QUADRUPLE PRECISION mit der \mathcal{H} -Transformation gar keine und mit der \mathcal{I} -Transformation nur eine

Tabelle 5.15: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
12	6	0.97	2.00	2.10	1.88	2.03	3.22
18	9	1.13	4.25	3.51	3.86	3.10	3.57
24	12	1.27	5.24	4.66	4.58	4.34	5.60
30	15	1.39	6.12	6.64	5.58	6.05	6.34
36	18	1.51	7.35	7.62	7.20	6.51	8.54
42	21	1.62	9.63	8.97	9.20	7.75	9.00
48	24	1.73	11.73	10.19	9.58	8.33	10.99
54	27	1.85	11.53	11.74	10.86	9.62	11.73
60	30	1.97	12.72	12.84	12.23	10.52	13.57
66	33	2.12	14.59	14.66	15.28	11.69	14.46
72	36	2.29	16.06	15.62	14.77	12.65	16.25
78	39	2.54	16.96	17.29	15.92	13.86	17.17
84	42	3.00	18.12	18.29	17.24	14.95	18.89
90	45	3.18	19.78	20.07	20.32	16.11	19.90
96	48	2.67	21.12	20.98	19.87	17.26	21.55

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

mittlere Konvergenzbesserung auf 4-5 Stellen (Tabelle 5.17). In DOUBLE PRECISION können laut Tabelle 5.26 wiederum keine Konvergenzverbesserung im Falle der \mathcal{H} -Transformation und nur 2-3 Dezimalstellen für $n = 18$ im Falle der \mathcal{I} -Transformation erreicht werden, wobei die Genauigkeit für größere n wieder deutlich sinkt. Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 10$ erlaubt es im Falle von QUADRUPLE PRECISION, aus den ersten 481 Termen der ursprünglichen Fourier-Reihe mit der \mathcal{H} -Transformation etwa 14 Stellen und mit der \mathcal{I} -Transformation etwa 17 Stellen zu gewinnen (Tabelle 5.18). Im Falle von DOUBLE PRECISION kann man durch Frequenzverzehnfachung mit $\tau = 10$

Tabelle 5.16: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
18	6	1.13	5.18	2.59	3.29	2.42	3.02
27	9	1.04	5.17	5.08	4.25	3.85	4.70
36	12	1.51	7.16	6.02	6.15	5.80	7.14
45	15	1.23	8.83	7.76	7.55	6.80	8.32
54	18	1.85	10.70	10.18	8.95	8.12	9.80
63	21	1.36	12.44	11.98	10.82	9.72	11.49
72	24	2.29	14.29	13.98	12.07	11.07	13.55
81	27	1.45	16.07	14.48	14.05	12.32	15.07
90	30	3.18	17.91	16.01	15.36	13.87	16.45
99	33	1.54	19.71	18.97	17.28	16.06	18.26
108	36	2.34	21.55	19.39	18.82	16.58	20.93
117	39	1.62	23.37	21.43	20.50	17.99	21.85
126	42	2.14	25.21	23.50	22.60	19.84	23.33
135	45	1.71	27.03	24.92	23.63	21.34	24.99
144	48	2.04	28.87	26.60	26.76	22.21	27.06
150	50	2.01	30.52	27.44	26.08	24.26	27.83

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

etwa 7 exakte Stellen mit der \mathcal{H} - und etwa 8-9 Stellen mit der \mathcal{I} -Transformation erzielen, wobei die ersten 241 Terme der ursprünglichen Reihe benötigt werden (Tabelle 5.27). Mehr Stellen kann man bei Verwendung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 20$ erzielen: Im Falle von QUADRUPLE PRECISION liefern die ersten 961 Partialsummen 24-25 Stellen laut Tabelle 5.19). Im Falle von DOUBLE PRECISION liefern die ersten etwa 541 Partialsummen der ursprünglichen Reihe mit 13-14 Stellen im wesentlichen Maschinengenauigkeit, wobei allerdings die Genauigkeit für größere n leicht absinkt (Tabelle

Tabelle 5.17: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	1.08	-2.42	0.44	-1.14	-2.03	0.33
9	1.72	-3.04	0.50	-0.44	-2.20	0.71
12	1.07	-4.41	1.21	-0.79	-3.88	1.38
15	0.89	-3.94	2.04	0.15	-3.87	1.81
18	0.81	-5.44	2.53	-0.31	-5.31	3.07
21	0.78	-5.66	2.32	0.17	-5.58	2.41
24	0.77	-7.14	2.74	0.23	-6.93	2.74
27	0.78	-6.90	4.67	-0.05	-7.12	3.70
30	0.81	-8.42	3.55	-0.14	-8.58	3.79
33	0.86	-8.48	3.81	0.08	-8.91	3.86
36	0.92	-8.57	4.53	-0.01	-10.11	4.38
39	1.01	-6.26	4.83	0.49	-8.03	5.23
42	1.12	-4.46	5.26	-0.78	-5.84	5.22
45	1.27	-1.33	3.21	-1.15	-3.33	2.94
48	1.51	0.58	1.15	-1.24	-1.81	0.80

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

5.28).

Wir bemerken, daß ähnlich wie bei den anderen Werten von α die Extrapolation auf der Basis der frequenzvervielfachten Reihe zum höheren Wert $\tau = 20$ numerisch stabiler ist als die zum kleineren Wert $\tau = 10$, da man im letzteren Fall in DOUBLE PRECISION keine Maschinengenauigkeit erzielen kann.

Der relative Fehler beträgt bei Anwendung der $d^{(2)}$ -Transformation mit $R_l = 10l$ bei einer Maschinengenauigkeit von etwa 33 Stellen laut [323, Tab. 3] bei Verwendung von 482 Termen der reellen Fourier-Reihe $1.2 \cdot 10^{-14}$. Dies ist geringfügig schlechter als der Wert $10^{-14.07} \approx 8.5 \cdot 10^{-15}$ zu $m = 481$ aus Tabelle 5.18 für die \mathcal{H} -Transformation bei Anwendung

Tabelle 5.18: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 10$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
60	6	1.38	1.06	1.75	1.33	0.54	1.37
90	9	1.41	2.71	2.96	2.99	2.25	3.20
120	12	1.36	3.57	4.20	4.10	2.63	5.03
150	15	3.02	4.39	6.25	4.90	4.27	5.61
180	18	1.52	5.14	6.22	6.19	5.03	6.30
210	21	1.80	6.20	7.19	6.80	5.79	7.45
240	24	1.86	6.84	8.48	8.61	6.52	10.50
270	27	1.70	8.22	10.29	8.72	7.44	9.68
300	30	4.10	8.73	10.41	10.69	8.12	10.52
330	33	1.78	11.04	11.41	10.66	9.38	11.73
360	36	2.03	10.95	12.77	12.14	10.02	13.52
390	39	2.07	11.73	14.13	12.63	11.33	13.82
420	42	1.89	12.69	14.60	13.88	12.12	14.75
450	45	4.50	13.33	15.64	14.62	12.40	16.01
480	48	1.94	14.07	17.09	15.71	13.12	17.45

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

auf die frequenzvervielfachte Reihe zu $\tau = 10$. Der relative Fehler der \mathcal{I} -Transformation mit $\gamma = 2$ für $m = 481$ ist laut Tabelle 5.18 sogar kleiner als 10^{-17} bei Anwendung auf die frequenzvervielfachte Reihe zu $\tau = 10$.

Damit haben wir die folgenden Resultate erhalten:

- In der Nähe von Sprungstellen und Singularitäten von Fourier-Reihen treten langwellige Oszillationen der Terme auf.
- Zusammenfassung von τ aufeinanderfolgenden Termen liefert eine frequenzvervielfachte Fourier-Reihe.

Tabelle 5.19: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 20$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (32-34 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
120	6	1.36	2.24	3.07	2.58	1.67	2.47
180	9	1.52	4.91	4.39	4.29	4.08	4.89
240	12	1.86	7.23	6.19	5.91	4.65	6.16
300	15	4.10	8.42	7.65	7.84	6.38	8.60
360	18	2.03	10.04	8.97	8.99	7.72	9.26
420	21	1.89	11.25	11.55	10.10	9.13	10.83
480	24	1.94	12.69	11.97	11.35	10.67	12.66
540	27	2.20	14.12	13.63	12.77	11.57	13.71
600	30	4.14	15.61	15.22	14.18	12.57	15.72
660	33	2.30	17.37	16.49	15.77	13.85	16.81
720	36	2.12	18.90	18.84	17.43	15.13	18.30
780	39	2.15	22.74	19.54	19.45	16.65	20.27
840	42	2.38	22.82	21.10	20.14	18.27	21.23
900	45	3.63	23.64	22.86	21.34	19.15	23.18
960	48	2.48	25.08	23.98	22.65	20.08	24.38

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathfrak{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathfrak{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathfrak{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathfrak{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

- Die Extrapolation von frequenzvervielfachten Fourier-Reihen mit geeignetem τ ist in der Nähe von Singularitäten und Sprungstellen der Extrapolation der Fourier-Reihe selbst deutlich überlegen. Dies trifft nicht nur auf die $d^{(m)}$ -Transformation von Levin und Sidi [223], sondern auch auf die \mathcal{H} - und die \mathfrak{I} -Transformation mit $\gamma = 2$ zu.
- Die numerische Stabilität der \mathcal{H} - und der \mathfrak{I} -Transformation mit $\gamma = 2$ kann durch Verwendung von frequenzvervielfachten Fourier-Reihen deutlich erhöht werden. Die \mathcal{H} -Transformation ist dabei nicht so stabil wie die \mathfrak{I} -Transformation mit $\gamma = 2$. Die Stabilisierung durch Erhöhung von τ ist besonders wichtig in DOUBLE PRECISI-

Tabelle 5.20: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	-0.62	0.61	1.52	0.79	1.30	1.48
9	-0.47	2.62	1.79	2.01	2.99	2.03
12	-0.34	3.67	2.99	3.00	3.14	3.64
15	-0.23	4.68	4.90	4.13	4.09	5.17
18	-0.13	5.90	6.35	5.77	4.98	6.99
21	-0.03	8.87	7.68	7.35	6.13	7.59
24	0.07	9.21	8.85	7.92	6.94	9.35
27	0.18	10.18	10.20	9.63	8.37	10.30
30	0.30	10.32	11.07	10.61	9.15	11.22
33	0.43	8.90	9.95	9.52	9.55	9.86
36	0.59	7.85	9.25	8.61	8.03	9.16
39	0.82	7.29	8.78	8.01	7.26	8.70
42	1.19	6.64	8.66	7.55	6.54	8.56
45	1.84	7.14	8.07	7.99	6.16	7.99
48	1.08	5.44	7.19	6.50	6.99	7.10

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

ON.

- Die Verwendung von genügend hohem τ erlaubt es häufig, auch in der Nähe von Singularitäten Maschinengenauigkeit zu erzielen, sofern man genügend viele Terme der Reihe berechnen kann.

Tabelle 5.21: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
12	6	-0.34	2.67	2.95	2.04	2.55	2.44
18	9	-0.13	4.79	4.68	3.66	3.35	4.36
24	12	0.07	7.31	5.78	5.99	6.07	7.20
30	15	0.30	9.78	7.52	7.38	6.93	9.19
36	18	0.59	12.25	9.43	9.41	9.25	10.55
42	21	1.19	14.17	11.47	11.25	10.19	12.59
48	24	1.08	14.44	14.18	12.83	12.86	14.54
54	27	0.71	14.55	14.76	14.46	13.84	14.57
60	30	0.55	14.66	14.89	14.76	14.61	14.82
66	33	0.47	14.86	14.82	14.79	14.70	14.93
72	36	0.43	14.73	14.76	14.70	14.76	14.76
78	39	0.41	14.76	14.70	14.68	14.79	14.63
84	42	0.41	14.66	14.66	14.61	14.73	14.63
90	45	0.42	14.82	15.09	14.66	14.68	15.33
96	48	0.46	15.33	14.86	15.93	14.89	14.70

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet. Es wurden $m + 1$ Terme der Fourier-Reihe und $n + 1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Tabelle 5.22: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/3.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
18	6	-0.13	4.06	4.45	3.76	2.66	3.56
27	9	0.18	6.90	6.53	6.15	5.39	6.91
36	12	0.59	9.58	9.66	8.67	7.70	10.39
45	15	1.84	12.63	12.39	11.45	10.00	13.05
54	18	0.71	14.66	14.70	14.02	12.12	14.59
63	21	0.51	14.68	14.76	14.63	14.27	14.66
72	24	0.43	14.76	14.76	14.93	14.76	14.73
81	27	0.40	14.70	14.68	14.76	14.70	14.70
90	30	0.42	14.66	14.76	14.73	14.66	14.82
99	33	0.48	15.46	14.86	15.63	14.76	14.98
108	36	0.57	14.57	14.24	14.49	15.09	14.28
117	39	0.73	14.18	14.09	14.17	14.38	14.10
126	42	0.98	14.09	14.08	14.08	14.15	14.09
135	45	1.62	14.09	14.15	14.10	14.09	14.14
144	48	1.31	14.14	14.14	14.16	14.10	14.17

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet. Es wurden $m + 1$ Terme der Fourier-Reihe und $n + 1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Tabelle 5.23: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	0.75	0.76	1.06	1.21	0.70	1.16
9	0.64	2.75	2.11	2.53	2.55	2.20
12	0.97	2.53	2.96	2.72	3.38	3.18
15	0.83	3.37	3.99	4.25	3.05	4.28
18	1.13	4.69	5.26	4.49	3.58	6.27
21	0.95	4.62	7.31	5.75	4.68	6.39
24	1.27	5.34	6.93	6.16	5.55	6.89
27	1.04	4.50	6.77	5.53	4.22	6.65
30	1.39	2.83	5.98	4.90	2.92	5.92
33	1.12	2.08	4.73	3.46	1.97	4.60
36	1.51	-0.46	4.00	2.32	0.18	3.86
39	1.18	-0.09	2.76	1.38	-1.92	2.71
42	1.62	0.07	1.43	-0.37	-1.11	1.34
45	1.23	0.78	0.47	-0.81	-1.42	0.35
48	1.73	0.59	-0.53	-0.94	-1.28	-0.76

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Tabelle 5.24: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 2$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
12	6	0.97	2.00	2.10	1.88	2.03	3.22
18	9	1.13	4.25	3.51	3.86	3.10	3.57
24	12	1.27	5.24	4.66	4.58	4.34	5.60
30	15	1.39	6.12	6.64	5.58	6.05	6.34
36	18	1.51	7.35	7.62	7.20	6.51	8.54
42	21	1.62	9.63	8.97	9.20	7.75	9.00
48	24	1.73	11.72	10.19	9.58	8.33	11.01
54	27	1.85	10.82	11.72	10.81	9.64	11.54
60	30	1.97	10.55	12.25	12.49	10.38	11.80
66	33	2.12	10.57	11.69	11.61	10.42	11.36
72	36	2.29	9.93	11.28	11.19	9.96	10.64
78	39	2.54	9.22	10.49	10.57	11.06	10.45
84	42	3.00	8.38	10.20	9.83	8.89	10.67
90	45	3.18	8.66	9.84	8.91	8.20	9.66
96	48	2.67	6.91	9.03	8.29	8.13	8.88

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Tabelle 5.25: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 3$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/6.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
18	6	1.13	5.18	2.59	3.29	2.42	3.02
27	9	1.04	5.17	5.08	4.25	3.85	4.70
36	12	1.51	7.16	6.02	6.15	5.80	7.14
45	15	1.23	8.83	7.76	7.55	6.80	8.32
54	18	1.85	10.70	10.18	8.95	8.12	9.80
63	21	1.36	12.44	11.98	10.82	9.72	11.49
72	24	2.29	14.31	14.02	12.07	11.07	13.56
81	27	1.45	15.18	14.48	14.04	12.32	14.74
90	30	3.18	15.08	15.08	14.94	13.89	15.18
99	33	1.54	15.78	15.18	15.31	15.01	15.31
108	36	2.34	15.18	15.78	15.18	15.31	14.83
117	39	1.62	15.78	15.31	15.78	15.18	15.48
126	42	2.14	15.18	15.01	14.94	14.88	14.83
135	45	1.71	15.48	15.01	15.48	15.78	15.08
144	48	2.04	14.78	15.78	15.18	15.01	15.18

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Ein Eintrag ∞ bedeutet, daß der Fehler verschwindet. Es wurden $m + 1$ Terme der Fourier-Reihe und $n + 1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Tabelle 5.26: Konvergenzbeschleunigung der Fourier-Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen)

n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
6	1.08	-2.42	0.44	-1.14	-2.03	0.33
9	1.72	-3.04	0.50	-0.44	-2.20	0.71
12	1.07	-4.41	1.21	-0.79	-3.88	1.38
15	0.89	-3.95	2.04	0.15	-3.87	1.81
18	0.81	-3.02	2.59	-0.32	-5.11	2.83
21	0.78	-1.05	0.76	-1.92	-3.01	0.49
24	0.77	-0.85	-1.52	-3.79	-3.37	-1.84
27	0.78	-0.59	-3.55	-2.88	-3.38	-3.29
30	0.81	-0.21	-3.10	-2.34	-3.25	-3.18
33	0.86	0.04	-2.49	-1.79	-2.93	-3.17
36	0.92	0.84	-2.67	-4.14	-3.70	-3.84
39	1.01	-0.58	-2.69	-2.63	-3.69	-3.66
42	1.12	-0.15	-2.72	-2.52	-4.09	-3.00
45	1.27	0.07	-3.05	-2.80	-3.58	-2.86
48	1.51	0.17	-3.37	-4.49	-3.45	-3.23

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers).

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme s_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 3/2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 1, 1, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\alpha, 3/2, 2, \{s_n\}, \{\mu(a_n, b_n)\})$.

Tabelle 5.27: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 10$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
60	6	1.38	1.06	1.75	1.33	0.54	1.37
90	9	1.41	2.71	2.96	2.99	2.25	3.20
120	12	1.36	3.57	4.20	4.10	2.63	5.03
150	15	3.02	4.39	6.25	4.90	4.27	5.61
180	18	1.52	5.14	6.22	6.19	5.03	6.30
210	21	1.80	6.20	7.19	6.80	5.79	7.45
240	24	1.86	7.09	8.44	8.39	6.56	9.44
270	27	1.70	7.05	8.28	8.29	6.60	8.16
300	30	4.10	6.68	7.14	6.30	4.99	7.00
330	33	1.78	4.56	6.09	4.99	3.68	5.97
360	36	2.03	3.13	4.97	3.73	2.20	4.85
390	39	2.07	1.78	3.98	2.63	1.01	3.87
420	42	1.89	0.05	3.09	1.50	-0.39	2.95
450	45	4.50	-1.24	2.27	0.55	-1.40	2.14
480	48	1.94	-0.86	1.44	-0.54	-2.94	1.32

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

Tabelle 5.28: Konvergenzbeschleunigung der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe (5.99) mit $\tau = 20$ zur Reihe (5.62) für $q = 1$ und $\alpha = \pi/50.1$ (14-15 Stellen)

m	n	A_n	B_n	C_n	D_n	E_n	F_n
120	6	1.36	2.24	3.07	2.58	1.67	2.47
180	9	1.52	4.91	4.39	4.29	4.08	4.89
240	12	1.86	7.23	6.19	5.91	4.65	6.16
300	15	4.10	8.42	7.65	7.84	6.38	8.60
360	18	2.03	10.04	8.97	8.99	7.72	9.26
420	21	1.89	11.25	11.55	10.10	9.13	10.83
480	24	1.94	12.68	11.97	11.35	10.67	12.62
540	27	2.20	13.30	14.15	12.84	11.57	13.55
600	30	4.14	12.53	13.21	12.80	13.05	12.98
660	33	2.30	12.27	13.10	12.58	12.37	12.92
720	36	2.12	12.11	13.78	12.76	12.13	13.10
780	39	2.15	13.15	12.79	12.38	12.20	13.01
840	42	2.38	11.58	12.43	11.81	13.07	12.36
900	45	3.63	11.15	12.34	11.53	11.77	12.04
960	48	2.48	10.70	12.33	11.36	11.09	11.75

Zahl exakter Stellen (definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers). Es wurden $m+1$ Terme der Fourier-Reihe und $n+1$ Terme der frequenzvervielfachten Fourier-Reihe verwendet.

A_n : Zahl exakter Stellen der Partialsumme \check{s}_n .

B_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{H}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

C_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

D_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 3/2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

E_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 1, 1, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

F_n : Zahl exakter Stellen von $\mathcal{I}_{n-\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\tau \alpha, 3/2, 2, \{\check{s}_n\}, \{(m+1)\mu(a_m, b_m)\})$.

5.4 Rückführung von Fourier-Reihen auf andere Reihen

In diesem Abschnitt werden verschiedene Verfahren besprochen, wie man Konvergenzbeschleunigung von Fourier-Reihen dadurch erzielen kann, daß man das Problem auf die Konvergenzbeschleunigung von Reihen mit anderem Konvergenztyp zurückführt. Dies erlaubt dann die Verwendung von anderen Extrapolationsverfahren, die für die letzteren Reihen bekanntermaßen gute Ergebnisse zeitigen.

5.4.1 Rückführung auf alternierende Reihen

Eine sehr einfache Idee für die Konvergenzbeschleunigung reeller Fourier-Reihen ist, das Vorzeichenmuster der Terme

$$A_n = a_n \cos(n\alpha) + b_n \sin(n\alpha) \quad (5.112)$$

zu betrachten, um eine alternierende Reihe zu erhalten. Man faßt dazu aufeinander folgende Terme gleichen Vorzeichens der Fourier-Reihe jeweils zu einem Term der alternierenden Reihe zusammen.

Das bedeutet, daß man beginnend mit $n = 0$ alle Terme aufsummiert, die das gleiche Vorzeichen wie A_0 haben. Ist A_{n_0} der erste Term mit anderem Vorzeichen, so definiert

$$A'_0 = \sum_{n=0}^{n_0-1} A_n \quad (5.113)$$

den ersten Term der alternierenden Reihe. Tritt der nächste Vorzeichenwechsel bei n_1 auf, so ist

$$A'_1 = \sum_{n=n_0}^{n_1-1} A_n \quad (5.114)$$

der nächste Term der alternierenden Reihe. Dies setzt man für die höheren Terme analog fort.

Die Partialsummen der Fourier-Reihe sind dann definiert als

$$s_n = \sum_{j=0}^n A_j, \quad (5.115)$$

die der alternierenden Reihe als

$$s'_n = \sum_{j=0}^n A'_j. \quad (5.116)$$

In Tabelle 5.29 wird dieses Verfahren am Beispiel der vom Intervall $(-\pi, \pi)$ periodisch fortgesetzten Funktion $f_1(\alpha) = \alpha^2$ demonstriert. Es stehen jeweils Werte in der selben Zeile, die aus gleichvielen Termen der ursprünglichen Fourier-Reihe berechnet wurden. In diesem Beispiel benötigt man also beispielsweise zur Berechnung der Partialsummen bis

Tabelle 5.29: Rückführung der Fourier-Reihe (5.94) für $\alpha = 2.3$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation

n	m	$-\lg s_m/\alpha^2 - 1 $	$-\lg B_n/\alpha^2 - 1 $	$-\lg C_n/\alpha^2 - 1 $
4	16	2.51	3.95	3.88
5	20	2.67	4.20	4.14
6	24	2.82	4.86	4.63
7	27	2.97	6.50	5.52
8	31	3.05	4.97	5.06
9	35	3.14	4.70	4.74
10	39	3.24	4.74	4.73
11	42	3.33	4.98	4.92
12	46	3.38	5.33	5.23
13	50	3.44	5.50	5.46
14	54	3.52	5.44	5.45
15	57	3.58	5.47	5.46
16	61	3.61	5.68	5.62
17	65	3.67	6.16	6.00
18	69	3.74	7.86	6.80
19	72	3.77	7.21	7.34
20	76	3.80	6.97	7.01

n : Index der Partialsummen der alternierenden Reihe.

m : Entsprechender Index der Fourier-Reihe.

$B_n = t_n^{(0)}(1, s'_0)$: t -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

$C_n = u_n^{(0)}(1, s'_0)$: u -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

$n = 20$ der alternierenden Reihe die Terme der Fourier-Reihe bis $m = 76$. Man erkennt, daß das Verfahren hier eine milde Konvergenzverbesserung liefert.

In den Tabelle 5.30 und 5.31 wird das Verfahren auf die Fourier-Reihe (5.110) der vom Intervall $(-\pi, \pi)$ periodisch fortgesetzten Funktion $f(\alpha) = \alpha$ für zwei verschiedene Werte von α angewandt. Wieder stehen jeweils Werte in der selben Zeile, die aus gleichvielen Termen der ursprünglichen Fourier-Reihe berechnet wurden.

In Tabelle 5.30 ist $\alpha = 0.7\pi$ gewählt. In diesem Beispiel benötigt man zur Berechnung der Partialsummen bis $n = 25$ der alternierenden Reihe die Terme der Fourier-Reihe bis $m = 86$. Auch in diesem Fall wird durch Anwendung der Levin-Transformation auf die zugeordnete alternierende Reihe eine leichte Konvergenzverbesserung erzielt.

In Tabelle 5.31 ist $\alpha = 0.9\pi$ gewählt. Man ist demnach deutlich näher an der Sprung-

Tabelle 5.30: Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.7\pi$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation

n	m	$-\lg s_m/\alpha - 1 $	$-\lg B_n/\alpha - 1 $	$-\lg C_n/\alpha - 1 $
5	20	1.35	3.03	2.84
6	23	1.37	3.05	3.31
7	26	1.43	2.81	2.85
8	30	1.53	2.95	2.91
9	33	1.53	3.66	3.37
10	36	1.57	3.27	3.44
11	40	1.65	3.12	3.15
12	43	1.64	3.30	3.25
13	46	1.67	4.66	3.89
14	50	1.75	3.46	3.58
15	53	1.73	3.38	3.39
16	56	1.76	3.63	3.56
17	60	1.83	4.40	4.67
18	63	1.81	3.64	3.73
19	66	1.83	3.62	3.62
20	70	1.89	3.95	3.85
21	73	1.87	4.26	4.75
22	76	1.89	3.82	3.88
23	80	1.95	3.85	3.84
24	83	1.93	4.31	4.16
25	86	1.94	4.28	4.52

n : Index der Partialsummen der alternierenden Reihe.

m : Entsprechender Index der Fourier-Reihe.

$B_n = t_n^{(0)}(1, s'_0)$: t -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

$C_n = u_n^{(0)}(1, s'_0)$: u -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

stelle der Funktion bei π . In diesem Beispiel benötigt man deutlich mehr Terme der ursprünglichen Reihe zur Berechnung der alternierenden Reihe, da die Oszillationen langsamer sind. Zur Berechnung der Partialsummen bis $n = 18$ der alternierenden Reihe braucht man die Terme der Fourier-Reihe bis $m = 189$. In diesem Fall wird durch Anwendung der Levin-Transformation auf die zugeordnete alternierende Reihe eine sehr deutliche Konvergenzverbesserung erzielt. Offensichtlich ändern sich die Terme der alternierenden Reihe

Tabelle 5.31: Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.9\pi$ auf eine alternierende Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation

n	m	$-\lg s_m/\alpha - 1 $	$-\lg B_n/\alpha - 1 $	$-\lg C_n/\alpha - 1 $
5	59	1.43	6.75	5.85
6	69	1.50	8.87	7.38
7	79	1.56	9.29	9.15
8	89	1.61	11.10	9.92
9	99	1.65	12.15	11.91
10	109	1.69	13.27	12.93
11	119	1.73	15.80	13.91
12	129	1.77	15.80	∞
13	139	1.80	15.80	15.33
14	149	1.83	15.33	15.33
15	159	1.86	15.20	15.50
16	169	1.88	15.20	15.50
17	179	1.91	15.33	15.50
18	189	1.93	15.33	15.33

n : Index der Partialsummen der alternierenden Reihe.

m : Entsprechender Index der Fourier-Reihe.

$B_n = t_n^{(0)}(1, s'_0)$: t -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

$C_n = u_n^{(0)}(1, s'_0)$: u -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die alternierende Reihe.

wesentlich systematischer als im Falle $\alpha = 0.7\pi$, was wohl durch die höhere Zahl von Termen der Fourier-Reihe je Term der alternierenden Reihe bedingt ist.

Dieses Ergebnis ist insofern von Interesse, da ja die meisten Verfahren in der Nähe von Sprungstellen der Funktion oder ihrer Ableitungen deutlich langsamer konvergieren, was wir im Abschnitt 5.3 untersuchen. Das Beispiel in Tabelle 5.31 zeigt, daß die Rückführung auf alternierende Reihen in der Nähe von Sprungstellen erfolgreiche Beschleunigung erlaubt, wobei allerdings eine relativ hohe Zahl von Termen der Fourier-Reihe benötigt wird.

Die Berechnungen für die Tabellen in diesem Abschnitt wurden unter FORTRAN DOUBLE PRECISION durchgeführt, was auf dem verwendeten Computer 14-16 Stellen entspricht.

5.4.2 Rückführung auf komplexe Potenzreihen

In diesem Abschnitt besprechen wir die Berechnung von Fourier-Reihen, die durch Darstellungen durch Reihen mit komplexen Termen ermöglicht wird.

Die einfachste Möglichkeit im Falle einer reellen Fourier-Reihe besteht darin, sie als Realteil einer komplexen Potenzreihe zu schreiben. [59, Abschn. 6.1.3],[162] [323],[329] Im Falle der Fourier-Reihe (5.1) mit reellen Fourier-Koeffizienten a_j und b_j führt man dazu eine assoziierte Reihe

$$t = a_0/2 + \sum_{k=1}^{\infty} [a_k - ib_k] \exp(ik\alpha) \quad (5.117)$$

mit Partialsummen

$$t_0 = a_0/2; \quad t_n = a_0/2 + \sum_{k=1}^n [a_k - ib_k] \exp(ik\alpha) \quad (5.118)$$

ein. Dann gilt

$$s = \Re(t); \quad s_n = \Re(t_n). \quad (5.119)$$

Die assoziierte Reihe hat die Struktur einer komplexen Potenzreihe in der Variablen $z = \exp(i\alpha)$.

Diese Potenzreihe kann man mit verschiedenen Verfahren wie dem ϵ -Algorithmus von Wynn [399], der Transformation von Levin [222], der \mathcal{J} -Transformation oder der d -Transformation von Levin und Sidi [223] in Kombination mit dem $W^{(m)}$ -Algorithmus von Ford und Sidi [123] beschleunigen und schließlich vom Resultat den Realteil nehmen, um Näherungswerte für die Fourier-Reihe s aus Gl. (5.1) zu berechnen. Im Falle von Levin-artigen Verfahren sind t - und u -Varianten erfolgreich, wie wir sehen werden. Dieses Verfahren nennen wir *Methode der assoziierten Reihe*.

Ein Beispiel ist die Fourier-Reihe der 2π -periodischen Funktion, die im Intervall $(-\pi, \pi)$ identisch ist mit $f(\alpha) = \alpha$. Ergebnisse der Methode der assoziierten Reihe auf dieses schon mehrfach verwendete Beispiel sind in Tabelle 5.32 demonstriert. Diese Berechnung wurde unter Maple V mit zweiunddreißig Stellen (Digits=32) durchgeführt. Halbiert man die Zahl der Stellen, so treten Stellenverluste auf. Die Zahl exakter Stellen, definiert als der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers, beträgt 8.9 für Digits=16 und $n = 20$ und verringert sich für größere Werte von n wieder. Dies ist wesentlich durch die große Nähe zu der Unstetigkeitsstelle bei $\alpha = \pi$ bedingt. In einem späteren Abschnitt werden wir auf dieses Beispiel zurückkommen und zeigen, daß man durch geschickte Wahl der zu extrapolierenden Folge auch mit nur sechzehn Stellen alle Stellen des wahren Grenzwertes reproduzieren kann. Hierzu werden jedoch $O(10^2)$ Terme der Reihe benötigt.

Vergleich der Tabellen 5.31 und 5.32 zeigt, daß die Methode der assoziierten Reihe der Rückführung auf alternierende Reihen zumindest in diesem Fall deutlich überlegen ist, sofern man eine genügend hohe Stellenzahl verwenden kann.

Etwas komplizierter wird es im Falle von komplexen Fourier-Reihen, also solchen mit komplexen Koeffizienten a_j und/oder b_j . In diesem Fall kann man sich helfen, indem man mehrere komplexe Potenzreihen betrachtet. Setzt man

$$\begin{aligned} A_{\pm} &= a_0/2 + \sum_{j=1}^{\infty} a_j \exp(\pm ij\alpha), \\ B_{\pm} &= \sum_{j=1}^{\infty} b_j \exp(\pm ij\alpha), \end{aligned} \quad (5.120)$$

Tabelle 5.32: Rückführung der Fourier-Reihe von α in $(-\pi, \pi)$ für $\alpha = 0.9\pi$ auf eine assoziierte Reihe und Extrapolation durch die Levin-Transformation

n	$-\lg s_n/\alpha - 1 $	$-\lg B_n/\alpha - 1 $
10	0.3	4.8
12	0.6	5.1
14	2.0	6.0
16	0.7	7.4
18	0.5	8.2
20	0.6	8.9
22	0.8	9.9
24	2.0	11.9
26	0.8	11.9
28	0.7	12.7
30	0.7	13.9
32	1.0	15.2
34	1.9	15.6
36	1.0	16.5
38	0.8	18.1
40	0.9	19.3

n : Index der Partialsummen von Fourier- und assoziierter Reihe.

$B_n = \Re(u_n^{(0)}(1, t_0))$: u -Variante der Levin-Transformation, angewandt auf die assoziierte Reihe.

und

$$\begin{aligned}
 s_\gamma &= a_0/2 + \sum_{j=1}^{\infty} a_j \cos(j\alpha) = \frac{1}{2}[A_+ + A_-], \\
 s_\sigma &= \sum_{j=1}^{\infty} b_j \sin(j\alpha) = \frac{1}{2i}[B_+ - B_-],
 \end{aligned}
 \tag{5.121}$$

so gilt

$$s = s_\gamma + s_\sigma. \tag{5.122}$$

Im Falle reeller Fourier-Koeffizienten gilt $A_- = [A_+]^*$ und $B_- = [B_+]^*$ sowie $s_\gamma = \Re(A_+)$, $s_\sigma = \Im(B_+)$ und $s = \Re(A_+) + \Im(B_+)$. Die Reihen A_\pm und B_\pm sind wiederum komplexe Potenzreihen. Diese kann man nun jede für sich zum Beispiel mit den im voranstehenden Absatz genannten Methoden beschleunigen und die Resultate geeignet addieren, um eine Näherung für s zu erhalten. [323] Dieses Verfahren nennen wir *Methode der zugeordneten Reihen*.

Diese Rückführung auf komplexe Potenzreihen in der beschriebenen Form gelingt stets, wenn die Fourier-Koeffizienten a_j und b_j separat bekannt sind. Allerdings hängt die Wahl geeigneter Beschleunigungsverfahren für die Potenzreihen stark davon ab, wie sich die Fourier-Koeffizienten a_j und b_j als Funktion von j für große j verhalten. Sind diese Funktionen "glatt", also $O(q^j j^{-\gamma})$ für große j mit reellem q und positivem γ , so sind verschiedene Verfahren erfolgreich (ϵ -Algorithmus, t - und u -Varianten der Levin- und der \mathcal{J} -Transformation). Oszillieren die Koeffizienten, so sind nur wenige Methoden erfolgversprechend (die \mathcal{H} -Transformation sowie die Verallgemeinerungen auf mehrere Frequenzen aus Abschnitt 5.1.8, sowie die \mathcal{I} - und die d^m -Transformation und in begrenztem Maße der ϵ -Algorithmus). Wichtige Beispiele sind Fourier-Reihen mit mehreren Frequenzen, die im folgenden besprochen werden.

In Anwendungen treten häufiger Fourier-Reihen der Struktur

$$s = \sum_{j=0}^{\infty} \prod_{\ell=1}^L (a_{\ell,j} \cos(j\alpha_{\ell}) + b_{\ell,j} \sin(j\alpha_{\ell})) \quad (5.123)$$

auf, die von mehreren dem Anwender bekannten Frequenzen $\{\alpha_{\ell}\}_{\ell=1}^L$ abhängen.

Faßt man eine Fourier-Reihe der Struktur (5.123) als Fourier-Reihe in der Variablen $\alpha = \alpha_1$ der Struktur (5.1) auf, so oszillieren die Fourier-Koeffizienten

$$a_j = a_{1,j} \prod_{\ell=2}^L (a_{\ell,j} \cos(j\alpha_{\ell}) + b_{\ell,j} \sin(j\alpha_{\ell})) \quad (5.124)$$

und

$$b_j = b_{1,j} \prod_{\ell=2}^L (a_{\ell,j} \cos(j\alpha_{\ell}) + b_{\ell,j} \sin(j\alpha_{\ell})) \quad (5.125)$$

für $j > 0$.

Für Reihen von diesem Typ kann man die verallgemeinerte \mathcal{H} -Transformation aus Abschnitt 5.1.8 (oder auch die d^m -Transformation und den ϵ -Algorithmus) anwenden. Dabei benötigt man allerdings mehr Terme der Reihe als bei dem im folgenden beschriebenen Weg.

Durch Darstellung der Kosinus- und Sinusfunktionen in Gl. (5.123) durch komplexe Exponentialfunktionen mit nachfolgendem Ausmultiplizieren kann man Fourier-Reihen der Struktur (5.123) als Summe komplexer Potenzreihen darstellen. Diese kann man mit den oben angesprochenen Verfahren separat beschleunigen, und man erhält so Näherungswerte für die Potenzreihen. Der Wert der Fourier-Reihe wird dann durch die Summe dieser Näherungswerte approximiert. Dieses Verfahren nennen wir *verallgemeinerte Methode der zugeordneten Reihen*.

Dieses Verfahren soll an Beispielen verdeutlicht werden. Eine einfache Fourier-Reihe der Struktur (5.123) ist durch

$$\begin{aligned} f(\alpha_1, \alpha_2) &= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \cos(\alpha_1 m) \cos(\alpha_2 m) \\ &= -\pi^2/12 + (\min(\alpha_1, \alpha_2)^2 + (\max(\alpha_1, \alpha_2) - \pi)^2)/4 \end{aligned} \quad (5.126)$$

Tabelle 5.33: Beschleunigung der Fourier-Reihe (5.126) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = 8\pi/10$ und $\alpha_2 = \alpha_1/2^{1/2}$

n	$-\lg f_n(\alpha_1, \alpha_2)/f(\alpha_1, \alpha_2) - 1 $	$-\lg f'_n(\alpha_1, \alpha_2)/f(\alpha_1, \alpha_2) - 1 $
10	1.4	6.5
12	2.2	7.9
14	1.3	9.3
16	2.8	10.9
18	1.4	12.6
20	2.0	14.8
22	1.8	15.3
24	3.2	16.5
26	2.1	17.9
28	2.1	19.3
30	2.0	20.8
32	2.1	22.5
34	2.0	25.2
36	2.5	24.7
38	2.3	23.6
40	2.6	23.7

mit Partialsummen

$$f_n(\alpha_1, \alpha_2) = \sum_{m=1}^{n+1} \frac{1}{m^2} \cos(\alpha_1 m) \cos(\alpha_2 m), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (5.127)$$

gegeben. In der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen stellt man diese Reihe durch eine Summe

$$f(\alpha_1, \alpha_2) = \sum_{j=1}^4 p_j \quad (5.128)$$

von vier komplexen Potenzreihen der Form

$$p_j = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{4m^2} \exp(i m \tilde{\alpha}_j) \quad (5.129)$$

mit $\tilde{\alpha}_1 = \alpha_1 + \alpha_2$, $\tilde{\alpha}_2 = -\alpha_1 - \alpha_2$, $\tilde{\alpha}_3 = \alpha_1 - \alpha_2$ und $\tilde{\alpha}_4 = -\alpha_1 + \alpha_2$ dar. Die Partialsummen dieser Potenzreihen

$$p_{j,n} = \sum_{m=1}^{n+1} \frac{1}{4m^2} \exp(i m \tilde{\alpha}_j), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (5.130)$$

Tabelle 5.34: Beschleunigung der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$

n	$g_n(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$	$g'_n(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$
20	1.0668379118338712	1.0641155230966898
22	1.0646319010644110	1.0641155354240192
24	1.0624181211129220	1.0641155366967048
26	1.0616186381598774	1.0641155361516434
28	1.0621618930948200	1.0641155361058156
30	1.0629126952360728	1.0641155361297312
32	1.0631221548598504	1.0641155361313168
34	1.0630565825407210	1.0641155361302746
36	1.0633125461160056	1.0641155361302230
38	1.0639479826292972	1.0641155361302684
40	1.0644978847766702	1.0641155361302696
42	1.0646351478259112	1.0641155361302674
44	1.0645166041509708	1.0641155361302666
46	1.0644648067090496	1.0641155361302608
48	1.0645413732209338	1.0641155361302672
50	1.0645758026076632	1.0641155361303654

unterwirft man nun jeweils einer Folgentransformation. Wählen wir für jede Reihe dieselbe Transformation, zum Beispiel die u -Transformation von Levin, so erhält man eine Folge von Approximationen für f der Gestalt

$$f'_n(\alpha_1, \alpha_2) = \sum_{j=1}^4 u_n^{(0)}(1, p_{j,0}). \quad (5.131)$$

In Tabelle 5.33 werden die Partialsummen f_n der Fourier-Reihe mit den Näherungen f'_n verglichen. Aufgetragen sind jeweils die Zahl exakter Stellen, wie üblich als negativer dekadischer Logarithmus des relativen Fehlers definiert. Man erkennt eine deutliche Konvergenzverbesserung mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen. Die Genauigkeit der extrapolierten Werte ist am besten für $n = 34 - 36$ und fällt dann langsam für größere Werte von n . Die Resultate in Tabelle 5.33 wurden unter Maple V mit Digits=32 erhalten. Verdoppelt man die Stellenzahl auf Digits=64, so erhält man 27.9 exakte Stellen für $n = 40$ und 35.7 exakte Stellen für $n = 50$. Halbiert man die Stellenzahl auf Digits=16, so erhält man 12.0 exakte Stellen für $n = 17$ und 14.4 exakte Stellen für $n = 18$, während für größere n die Genauigkeit wieder kleiner wird.

Ein zweites, komplizierteres Beispiel ist die Fourier-Reihe

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{m^2} \cos(\alpha_1 m) \cos(\alpha_2 m) \cos(\alpha_3 m) \quad (5.132)$$

mit Partialsummen

$$g_n(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \sum_{m=1}^{n+1} \frac{1}{m^2} \cos(\alpha_1 m) \cos(\alpha_2 m) \cos(\alpha_3 m) \quad (5.133)$$

In der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen stellt man diese Reihe durch eine Summe

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \sum_{j=1}^8 q_j \quad (5.134)$$

von acht komplexen Potenzreihen der Form

$$q_j = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{8 m^2} \exp(i m \tilde{\alpha}_j) \quad (5.135)$$

mit $\tilde{\alpha}_1 = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, $\tilde{\alpha}_2 = -\tilde{\alpha}_1$, $\tilde{\alpha}_3 = \alpha_1 + \alpha_2 - \alpha_3$, $\tilde{\alpha}_4 = -\tilde{\alpha}_3$, $\tilde{\alpha}_5 = \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3$, $\tilde{\alpha}_6 = -\tilde{\alpha}_5$ und $\tilde{\alpha}_7 = -\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, $\tilde{\alpha}_8 = -\tilde{\alpha}_7$ dar. Die Partialsummen dieser Potenzreihen

$$q_{j,n} = \sum_{m=1}^{n+1} \frac{1}{8 m^2} \exp(i m \tilde{\alpha}_j), \quad n \in \mathbb{N}_0 \quad (5.136)$$

werden wieder als Input für die u -Transformation von Levin verwendet, um eine Folge von Approximationen für g der gemäß

$$g'_n(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \sum_{j=1}^8 u_n^{(0)}(1, q_{j,0}) \quad (5.137)$$

zu erhalten.

Dieses Beispiel wird in den Tabellen 5.34 – 5.36 untersucht. Die Daten wurden unter Maple V mit Digits=32 erhalten.

In Tabelle 5.34 werden die Partialsummen g_n der Fourier-Reihe mit den Näherungen g'_n verglichen. Auch für diese kompliziertere Reihe ergibt sich eine sehr deutliche Konvergenzverbesserung mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen.

Die Konvergenz ist bis $n = 42$ ziemlich gleichmäßig, für höhere n ist eine Verschlechterung zu beobachten.

Man kann nun zur Steigerung der erzielbaren Genauigkeit entweder die Stellenzahl der Rechnung erhöhen. Man kann aber auch das Verfahren der Frequenzvervielfachung einsetzen. Dazu definieren wir zu gegebenem τ die Approximationen

$$g_n^{(\tau)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \sum_{j=1}^8 \mathcal{L}_n^{(0)}(1, [q_{j,\tau n}]|_{n=0}, [(\tau n + 1)(q_{j,\tau n} - q_{j,(\tau n)-1})]|_{n=0}), \quad (5.138)$$

Tabelle 5.35: Beschleunigung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 2$ der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$

n	$g_{\tau n}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$	$g_n^{(2)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$
10	1.0668379118338712	1.0641157035479450
12	1.0624181211129220	1.0641156130271904
14	1.0621618930948200	1.0641155229665988
16	1.0631221548598504	1.0641155371290900
18	1.0633125461160056	1.0641155361420236
20	1.0644978847766702	1.0641155361166546
22	1.0645166041509708	1.0641155361321010
24	1.0645413732209338	1.0641155361301646
26	1.0644963120188820	1.0641155361302608
28	1.0644865387938350	1.0641155361302698
30	1.0643097008097368	1.0641155361302674
32	1.0635498655776198	1.0641155361302676
34	1.0637189077158576	1.0641155361302676

deren acht Terme man auch als Ergebnis der Anwendung der $d^{(1)}$ -Transformation mit $R_l = \tau l$ auf die zugeordneten Reihen auffassen kann.

In Tabelle 5.35 ist dabei $\tau = 2$ und in Tabelle 5.36 ist $\tau = 3$ gewählt. Man liest aus den Werten ab, daß zur Erzielung von 16 Nachkommastellen etwa 60 Koeffizienten der ursprünglichen Fourier-Reihe für $\tau = 2$ und etwas mehr als siebzig Koeffizienten für $\tau = 3$ benötigt werden. Dies kann man mit den 44 Koeffizienten vergleichen, die man im Falle von Tabelle 5.34 entsprechend $n = 43$ und $\tau = 1$ benötigt. Allerdings ist dort nicht genau zu entscheiden, welches die letzten drei Stellen des Ergebnisses sind.

Verringert man die Stellenzahl auf Digits=16, so erzielt man 9 Stellen für $\tau = 1$ und $n = 21$, 11 Stellen für $\tau = 2$ und $n = 18$ entsprechend $\tau n + 1 = 37$ Koeffizienten, 11 Stellen für $\tau = 3$ und $n = 15$ entsprechend 46 Koeffizienten, 14 Stellen für $\tau = 6$ und $n = 16$ entsprechend 97 Koeffizienten sowie 13 Stellen für $\tau = 10$ und $n = 13$ entsprechend 131 Koeffizienten. Durch geeignete Wahl von τ kann man also auch bei der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen die Algorithmen stabilisieren und die Stellenverluste aufgrund von Rundungsfehlern verringern.

Tabelle 5.36: Beschleunigung der frequenzvervielfachten Reihe zu $\tau = 3$ der Fourier-Reihe (5.132) mit der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen für $\alpha_1 = \pi/10$, $\alpha_2 = 2^{1/2}\pi/10$ und $\alpha_3 = -4\pi/10$

n	$g_{\tau n}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$	$g_n^{(3)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$
7	1.0658521479576092	1.0641110700608030
9	1.0617854023532320	1.0641158521306604
11	1.0630811611593686	1.0641155150537964
13	1.0642649507655460	1.0641155374226974
15	1.0644700418511348	1.0641155360594698
17	1.0645450137450582	1.0641155361334964
19	1.0645183650097528	1.0641155361301756
21	1.0636953781393952	1.0641155361302648
23	1.0638506348956798	1.0641155361302688
25	1.0640718910621728	1.0641155361302674
26	1.0640686861206392	1.0641155361302676
27	1.0640483438234590	1.0641155361302676

5.5 Methoden für Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen

Neben Fourier-Reihen stellen Entwicklungen nach anderen Sätzen orthogonaler Funktionen ein wichtiges Hilfsmittel in der mathematischen Naturwissenschaft dar. Ist für solche Entwicklungen im Falle von vollständigen Orthogonalsystemen eigentlich nur die Konvergenz im Mittel gegeben, so stellt man in der Praxis meist fest, daß die Orthogonalentwicklungen auch punktweise konvergieren und ihre termweise Summation numerisch trotz des in den meisten Fällen komplizierten Vorzeichenmusters der Terme relativ stabil bleibt.

Die Beschreibung komplizierter Systeme erfordert die Verwendung komplizierter Orthogonalfunktionen, die von mehreren Variablen und Indizes abhängen. Dann stellen die Orthogonalentwicklungen mehrfach unendliche und/oder "multivariate" Reihen dar. Die Frage der Extrapolation von solch komplizierten Reihen ist derzeit noch nicht ausreichend untersucht.

Wir werden uns daher im folgenden zunächst auf Extrapolationsverfahren für einfach unendliche Orthogonalreihen in zunächst einer Variablen beschränken. Im Falle von Entwicklung nach den Orthogonalpolynomen $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ betrachten wir also Reihen der Form

$$s(x) = \sum_{j=0}^{\infty} c_j P_j(x) \quad (5.139)$$

mit Partialsummen

$$s_n(x) = \sum_{j=0}^n c_j P_j(x). \quad (5.140)$$

Die Abhängigkeit von x wird im folgenden für $s = s(x)$ und $s_n = s_n(x)$ häufig unterdrückt. Die bestuntersuchten Beispiele für solche Reihen sind Entwicklungen nach den klassischen Orthogonalpolynomen [3, 234]. Dabei sind Legendre-, Gegenbauer- und Chebyshev-Polynome Spezialfälle der Jacobi-Polynome. Entwicklungen nach Legendre-Polynomen treten zum Beispiel bei der Lösung der Poisson-Gleichung in zylindersymmetrischen Systemen auf. Für Anwendungen in der Quantenmechanik sind ebenfalls Entwicklungen nach Hermite-Polynomen aufgrund der Relation zu harmonischen Oszillatoren und nach Laguerre-Polynomen aufgrund der Beziehung zu Eigenfunktionen des H -Atoms bedeutsam.

Hinsichtlich der Konvergenzbeschleunigung von Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen sind viele Ähnlichkeiten zu Fourier-Reihen festzustellen. Dies ist nicht überraschend, wenn man bedenkt, daß Sinus- und Kosinusfunktionen mit den Chebyshev-Polynomen $T_n(x)$ und $U_n(x)$ sehr eng verwandt sind [234, S. 257]:

$$T_n(\cos \alpha) = \cos(n\alpha), \quad U_n(\cos \alpha) = \frac{\sin([n+1]\alpha)}{\sin \alpha}. \quad (5.141)$$

Man kann daher jede Fourier-Reihe der Form (5.1) auch als Orthogonalentwicklung

$$s = a_0/2 + \sum_{j=1}^{\infty} (a_j T_j(x) + b_j \sin(\alpha) U_{j-1}(x)) \quad (5.142)$$

nach den Chebyshev-Polynomen mit $x = \cos \alpha$ darstellen. Umgekehrt kann man auch jede Entwicklung nach Chebyshev-Polynomen als Fourier-Reihe schreiben, wodurch auch alle Extrapolationsmethoden für Fourier-Reihen anwendbar werden.

Neben den Eigenschaften der Orthogonalität und Vollständigkeit ist ein wichtiges Charakteristikum eines Systems $\{P_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$ von Orthogonalpolynomen die Existenz einer Dreitermrekursion der Form

$$\zeta_n^{(0)} v_n + \zeta_n^{(1)} v_{n+1} + \zeta_n^{(2)} v_{n+2} = 0. \quad (5.143)$$

Die Koeffizienten $\zeta_n^{(j)}$ sind dabei für ein gegebenes System von Polynomen $P_n(x)$ eindeutig bestimmt und hängen im allgemeinen auch von x ab. Diese Rekursion hat neben den Orthogonalpolynomen $P_n(x)$ eine weitere, linear unabhängige Schar von Lösungen, die wir als *zugeordnete Funktionen* $Q_n(x)$ bezeichnen. Dies sind im allgemeinen keine Polynome.

Im Falle der Chebyshev-Polynome wird aus Gl. (5.143) die Dreitermrekursion (5.75) mit $x = \cos \alpha$, deren Koeffizienten nicht von n abhängen. In diesem Falle sind die den Chebyshev-Polynomen erster Art $T_n(x)$ zugeordneten Funktionen die Chebyshev-Polynome zweiter Art $U_n(x)$.

Im Falle von Fourier-Reihen haben wir im Zusammenhang mit der \mathcal{H} -Transformation eine geeignete Modellfolge der Gestalt (5.9) eingeführt, deren gradlinige Verallgemeinerung

auf den Fall von Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen die Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n \left(P_n(x) \sum_{j=0}^{k-1} \gamma_j (n + \beta)^{-j} + Q_n(x) \sum_{j=0}^{k-1} \delta_j (n + \beta)^{-j} \right). \quad (5.144)$$

darstellt.

Bisher wurde für die Modellfolge (5.144) kein ähnlich einfacher Levin-artiger Algorithmus gefunden, wie ihn im Falle der Modellfolge (5.4) die \mathcal{H} -Transformation darstellt. Will man einen für die Modellfolge (5.144) exakten, rekursiven Algorithmus, so bieten sich derzeit nur die Algorithmen (2.19) oder (2.21) als relativ komplizierte, mehrdimensionale Rekursionen zur Berechnung der E -Transformation an. Dies gilt, da die Modellfolge (5.144) ein Spezialfall des Kerns (2.16) der E -Transformation für gerades $K = 2k$ und

$$g_j(n) = \omega_n \begin{cases} P_n(x)(n + \beta)^{1-j} & \text{für } j = 1, \dots, k \\ Q_n(x)(n + \beta)^{k+1-j} & \text{für } j = k + 1, \dots, K \end{cases} \quad (5.145)$$

ist.

Die $d^{(m)}$ -Transformationen sind, wie Sidi gezeigt hat [323], ebenfalls in der Lage, Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen zu beschleunigen, verlangen allerdings für $m > 1$ einen verhältnismäßig hohen Aufwand zur Berechnung.

Erfolgreich anwendbar und kostengünstig sind dagegen — wie im Falle von Fourier-Reihen — zwei andere Extrapolationsmöglichkeiten: Einerseits die Iteration einfacher Folgentransformationen auf der Basis einer geeigneten Dreitermrekursion, und andererseits die Rückführung auf andere Reihentypen.

5.5.1 Ein iterativer Algorithmus für Orthogonalentwicklungen

Wir haben gesehen, daß man im Falle von Fourier-Reihen die \mathcal{I} -Transformation durch hierarchisch konsistente Iteration der einfachen Folgentransformation (5.73) gewinnen kann. Wir bemerken, daß diese einfache Folgentransformation auf der Dreitermrekursion (5.75) basiert und für die einfache Modellfolge (5.74) exakt ist.

Analog lautet im Fall von Orthogonalpolynomen eine einfache Modellfolge

$$s_n = s + \omega_n (c P_n(x) + d Q_n(x)), \quad (5.146)$$

für die die einfache Transformation

$$s_n^{(1)} = \frac{\zeta_n^{(0)} \frac{s_n}{\omega_n} + \zeta_n^{(1)} \frac{s_{n+1}}{\omega_{n+1}} + \zeta_n^{(2)} \frac{s_{n+2}}{\omega_{n+2}}}{\zeta_n^{(0)} \frac{1}{\omega_n} + \zeta_n^{(1)} \frac{1}{\omega_{n+1}} + \zeta_n^{(2)} \frac{1}{\omega_{n+2}}} \quad (5.147)$$

exakt ist, wie man bei Anwendung der Rekursion (5.143) auf die Größen $(s_n - s)/\omega_n$ leicht sieht.

In direkter Analogie zum Algorithmus (5.92) für die \mathcal{I} -Transformation erhält man durch Iteration die Transformation [161]

$$\begin{aligned} N_n^{(0)} &= s_n/\omega_n, & D_n^{(0)} &= 1/\omega_n, \\ N_n^{(k+1)} &= \left(\zeta_{n+k}^{(0)} N_n^{(k)} + \zeta_{n+k}^{(1)} N_{n+1}^{(k)} + \zeta_{n+k}^{(2)} N_{n+2}^{(k)} \right) / \delta_n^{(k)}, \\ D_n^{(k+1)} &= \left(\zeta_{n+k}^{(0)} D_n^{(k)} + \zeta_{n+k}^{(1)} D_{n+1}^{(k)} + \zeta_{n+k}^{(2)} D_{n+2}^{(k)} \right) / \delta_n^{(k)}, \\ \mathcal{K}_n^{(k)}(\{\delta_n^{(k)}\}, \{\zeta_n^{(j)}\}, \{s_n\}, \{\omega_n\}) &= N_n^{(k)} / D_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (5.148)$$

Als einfachen Test für diese \mathcal{K} -Transformation betrachten wir eine Entwicklung nach Legendre-Polynomen $P_n(x)$. Entwicklungen dieses Typs sind beispielsweise Lösungen der Laplace-Gleichung in Kugelkoordinaten für Problem mit azimuthaler Symmetrie [184, Abschn. 3.3] Die folgenden Rechnungen wurden in FORTRAN QUADRUPLE PRECISION mit 30-32 Stellen durchgeführt.

Wir wenden die Folgentransformation

$$\{s_n\} \longrightarrow \{s'_n = \mathcal{K}_{n-2}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\{(n+1)^{-1}\}, \{\gamma_n^{(j)}\}, \{s_n\}, \{(n+1)^{-1}\})\} \quad (5.149)$$

mit $\gamma_n^{(0)} = n+2$, $\gamma_n^{(1)} = -(2n+5)x$ und $\gamma_n^{(2)} = n+3$ an auf die Partialsummen

$$s_n = \sum_{j=0}^n \frac{1}{j+1} P_j(x) \quad (5.150)$$

der Reihe [286, S. 700, Gl. 5.10.1.5]

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k+1} P_k(x) = \ln \left(1 + \sqrt{\frac{2}{1-x}} \right). \quad (5.151)$$

Dies entspricht der Wahl $\omega_k = c_k$ wobei $c_k = 1/(k+1)$ die Koeffizienten in Gl. (5.151) sind. Man beachte, daß die Koeffizienten $\gamma_n^{(j)}$ im Vergleich zu Gl. (5.146) im Index n um Eins verschoben sind, da die Legendre-Polynome die Rekursion [286, p. 736]

$$(n+2)P_{n+2}(x) - (2n+3)xP_{n+1}(x) + (n+1)P_n(x) = 0 \quad (5.152)$$

erfüllen.

Man liest aus Tabelle 5.37 ab, daß für weite Bereiche des Argumentes x die \mathcal{K} -Transformation beachtliche Konvergenzbeschleunigung für die Reihe (5.151) bewirkt. Zu beachten ist der Wert $x = -2$, für den die Reihe divergiert. Es zeigt sich, daß die \mathcal{K} -Transformation diese divergente Reihe summieren kann, wobei allerdings etwas mehr Terme für eine bestimmte Genauigkeit benötigt werden als für negative x , für die die Reihe selbst konvergiert. Für wachsende x nimmt die erzielbare Genauigkeit ab, insbesondere in der Nähe der Singularität bei $x = 1$.

Mit einer Variante der Frequenzvervielfachung, die wir ja für Fourier-Reihen eingeführt haben, gelingt allerdings auch nahe an der Singularität eine stabile Extrapolation. Aus

Tabelle 5.37: Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für verschiedene Werte von x .

x	n_6	n_{10}	n_{12}	n_{14}	Stellen(s_{30})
-2.0	12	20	24	26	divergent
-1.0	6	10	12	14	< 2
-0.9	6	11	12	16	< 3
-0.8	6	11	14	16	< 3
-0.7	8	12	15	17	< 3
-0.6	8	12	16	18	< 3
-0.5	8	14	16	18	< 3
-0.4	8	14	17	20	< 3
-0.3	9	15	18	21	< 3
-0.2	9	15	18	21	< 3
-0.1	9	16	19	22	< 3
0.0	10	16	19	22	< 3
0.1	10	17	20	23	< 3
0.2	10	17	21	25	< 3
0.3	11	18	21	26	< 3
0.4	11	18	23	27	< 3
0.5	12	21	24	28	3
0.6	12	22	26	*	< 3
0.7	13	23	29	*	< 3
0.8	16	27	*	*	< 3
0.9	18	30	*	*	< 3

Aufgetragen sind die Indizes n_j , für die die transformierte Folge s'_n aus Gl. 5.149 für $n \geq n_j$ eine Genauigkeit von j Stellen aufweist. Ein Stern bedeutet, daß $0 \leq n_j \leq 30$ nicht erfüllt ist. Aufgetragen ist auch die Zahl exakter Stellen der Partialsummen s_{30} aus Gl. (5.150).

Gl. (5.152) liest man ab, daß für große n die Legendre-Polynome $P_n(x)$ asymptotisch die Rekursion (5.75) von $\cos(n\alpha)$ und $\sin(n\alpha)$ erfüllen, wenn man $x = \cos \alpha$ setzt. Frequenzvervielfachung von α auf $\tau \alpha$ entspricht demnach der Wahl

$$x_\tau = \cos\left(\tau \arccos(x)\right). \quad (5.153)$$

In den Tabellen 5.38 – 5.41 werden Anwendungen der \mathcal{K} -Transformation mit und ohne Frequenzvervielfachung auf die Reihe (5.151) in der Nähe der Singularität bei $x = 1$ vorgestellt. Die Rechnungen zu den Tabellen 5.38 – 5.41 wurden in FORTRAN DOUBLE PRECISION entsprechend etwa 14-16 Dezimalstellen durchgeführt.

Tabelle 5.38: Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.9$.

n	s_n	s'_n	$-\lg 1 - s_n/s $	$-\lg 1 - s'_n/s $
5	1.84118896	1.655149659863940	1.08	1.58
7	1.76075879	1.710091524398229	1.44	2.21
9	1.67828708	1.697957653702261	1.90	3.00
11	1.64468031	1.699774977858635	1.49	4.21
13	1.66051486	1.699721110941591	1.64	4.51
15	1.69764123	1.699642701569980	2.92	4.81
17	1.72507128	1.699676545453069	1.83	5.35
19	1.72762568	1.699667505300637	1.78	6.05
21	1.71027162	1.699669211402116	2.20	6.96
23	1.68958300	1.699668946296759	2.23	7.33
25	1.68036229	1.699668329497790	1.94	6.39
∞	1.69966903	1.699669025589012		

$$s'_n = \mathcal{K}_{n-2\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\{(n+1/2)^{-1}\}, \{\gamma_n^{(j)}\}, \{s_n\}, \{(n+1)^{-1}\})$$

In Tabelle 5.38 wird der Wert $x = 0.9$ ohne, in Tabelle 5.39 mit Frequenzvervielfachung gemäß $\tau = 3$ behandelt. Analog wird in Tabelle 5.40 der Wert $x = 0.95$ dicht bei der Singularität ohne, in Tabelle 5.41 mit Frequenzvervielfachung gemäß $\tau = 4$ behandelt. Man erkennt, daß ohne Frequenzvervielfachung die Extrapolation ineffizienter und instabiler ist, je näher man der Singularität kommt. Frequenzvervielfachung führt für beide Werte von x zu Extrapolationsergebnissen von 14 und mehr Dezimalstellen, also zu Maschinengenauigkeit, die natürlich auf einer höheren Zahl von Termen der Reihe basieren.

Für Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen mit Koeffizienten, die als Funktion des Summationsindex nicht oszillieren, ist — neben der komplizierter zu berechnenden $d^{(2)}$ -Transformation [323] und dem im nächsten Abschnitt zu besprechenden Verfahren der zugeordneten Reihen — aufgrund dieser Ergebnisse die \mathcal{K} -Transformation als eines der wenigen erfolgreichen, nichtlinearen Extrapolationsverfahren einzuschätzen.

5.5.2 Rückführung auf andere Reihentypen

Wie im Falle von Fourier-Reihen kann man Orthogonalentwicklungen auf komplexe Potenzreihen zurückführen. Bei Fourier-Reihen wurden dazu die trigonometrischen Funktionen durch komplexe Exponentialfunktionen dargestellt, wodurch nach Ausmultiplizieren die Fourier-Reihe als Summe komplexer Potenzreihen geschrieben konnte, die dann anderen Verfahren zur Konvergenzbeschleunigung zugänglich waren.

Tabelle 5.39: Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.9$ mit Frequenzvervielfachung $\tau = 3$.

m	n	s_m	s'_n	$-\lg 1 - s_m/s $	$-\lg 1 - s'_n/s $
18	6	1.72956738	1.699200064417397	1.75	3.56
24	8	1.68299191	1.699692606169673	2.01	4.86
30	10	1.70722867	1.699667944571655	2.35	6.20
36	12	1.69847571	1.699669019029939	3.15	8.41
42	14	1.69670035	1.699669032387828	2.76	8.40
48	16	1.70493856	1.699669024755232	2.51	9.31
54	18	1.69363821	1.699669025656950	2.45	10.40
60	20	1.70527158	1.699669025585073	2.48	11.63
66	22	1.69530790	1.699669025589124	2.59	13.18
72	24	1.70235381	1.699669025589018	2.80	14.47
∞		1.69966903	1.699669025589012		

$$s'_n = \mathcal{K}_{n-2\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\{(n+1/2)^{-1}\}, \{\gamma_n^{(0)} = n+2, \gamma_n^{(1)} = -(2n+5)*x_\tau, \gamma_n^{(2)} = n+3\}, \{s_{\tau n}\}, \{(\tau n+1)^{-1}\})$$

Auf Sidi [323] geht die Idee zurück, dies auf Entwicklungen der Form

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} [a_n \phi_n(x) + b_n \psi_n(x)] \quad (5.154)$$

zu verallgemeinern, wobei die Funktionen $\phi_n(x)$ und $\psi_n(x)$ sich durch

$$\rho_n^\pm(x) = \phi_n(x) \pm i\psi_n(x) = \exp(\pm in\xi x) g_n^\pm(x) \quad (5.155)$$

für $\xi \in \mathbb{R}$ mit

$$g_n^\pm(x) \sim n^\gamma \sum_{j=0}^{\infty} \delta_j^\pm(x) n^{-j} \quad (\gamma \in \mathbb{C}, n \rightarrow \infty) \quad (5.156)$$

darstellen lassen. Für Fourier-Reihen gilt $\phi_n(x) = \cos(n\xi x)$, $\psi_n(x) = \sin(n\xi x)$, $\rho_n^\pm = \exp(\pm in\xi x)$ und $g_n^\pm(x) = 1$. Für Entwicklungen nach Legendre-Polynomen $P_n(x)$ oder den zugeordneten Legendre-Funktionen zweiter Art $Q_n(x)$ der Ordnung Null kann man $\phi_n(\theta) = P_n(x)$ und $\psi_n(\theta) = (2/\pi)Q_n(x)$ mit $x = \cos\theta$ setzen, entsprechend $\xi = 1$ und $\gamma = -1/2$.

Sidi hat folgendes Verfahren vorgeschlagen [323]:

Schritt 1 Definiere unendliche Reihen $A^\pm(x)$ und $B^\pm(x)$ durch

$$A^\pm(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \rho_n^\pm(x), \quad B^\pm(x) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \rho_n^\pm(x) \quad (5.157)$$

Tabelle 5.40: Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.95$.

n	s_n	s'_n	$-\lg 1 - s_n/s $	$-\lg 1 - s'_n/s $
10	2.06521047	1.986952242722736	1.43	2.67
12	2.00096358	1.991597424640241	2.31	3.74
14	1.95499868	1.991452227256958	1.74	3.96
16	1.93652358	1.991114507836142	1.56	4.23
18	1.94333723	1.991260477172072	1.62	4.85
20	1.96599696	1.991230748045800	1.90	6.07
22	1.99255944	1.991224003588190	3.18	5.37
24	2.01279672	1.991180321708399	1.97	4.58
26	2.02095725	1.990863195431544	1.83	3.73
28	2.01661234	1.988301605367751	1.89	2.83
30	2.00370421	1.965065395109215	2.20	1.88
∞	1.99123245	1.991232445939118		

$$s'_n = \mathcal{K}_{n-2\lfloor n/2\rfloor}^{(\lfloor n/2\rfloor)}(\{(n+1/2)^{-1}\}, \{\gamma_n^{(j)}\}, \{s_n\}, \{(n+1)^{-1}\})$$

und beachte

$$\begin{aligned}
 F_\phi(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi(x) = \frac{1}{2}[A^+(x) + A^-(x)], \\
 F_\psi(x) &= \sum_{n=0}^{\infty} b_n \psi(x) = \frac{1}{2i}[B^+(x) - B^-(x)], \\
 F(x) &= F_\phi(x) + F_\psi(x).
 \end{aligned} \tag{5.158}$$

Schritt 2 Wende die $d^{(m)}$ -Transformation mit geeignetem m an, um die Grenzwerte der Reihen $A^\pm(x)$ und $B^\pm(x)$ näherungsweise zu berechnen.

Schritt 3 Verwende diese Näherungswerte in Verbindung mit Gl. (5.158), um ein Näherungswert von $F(x)$ zu berechnen.

Diese Methode setzt voraus, daß die Koeffizienten a_n und b_n unabhängig voneinander bekannt sind, also nicht nur $a_n \phi_n(x) + b_n \psi(x)$ als kombinierter Zahlenwert vorliegt.

Für "glatte", nichtoszillierende Koeffizienten a_n und b_n empfiehlt Sidi für Schritt 2 die $d^{(1)}$ -Transformation, für Koeffizienten dagegen, die selbst wieder oszillieren, die $d^{(m)}$ -Transformationen mit $m > 1$. In der Nähe von Singularitäten wird dabei die Verwendung von $R_l = \tau l$ empfohlen, was ja der Methode der Frequenzvervielfachung entspricht.

Im Falle von Fourier-Reihen entspricht der Vorschlag von Sidi dem Verfahren der zugeordneten Potenzreihen. Wir haben oben gezeigt, daß dieses verallgemeinert werden kann, falls die Fourier-Koeffizienten selbst Produkte von trigonometrischen Funktionen mit nichtoszillierenden Termen sind.

Tabelle 5.41: Beschleunigung der Entwicklung (5.151) für $x = 0.95$ mit Frequenzvervielfachung $\tau = 4$.

m	n	s_m	s'_n	$-\lg 1 - s_m/s $	$-\lg 1 - s'_n/s $
40	10	1.98394066	1.991229380519015	2.44	5.81
48	12	2.00230611	1.991232598679281	2.25	7.12
56	14	1.98092858	1.991232444088088	2.29	9.03
64	16	1.99804299	1.991232445174612	2.47	9.42
72	18	1.98886705	1.991232446064134	2.93	10.20
80	20	1.98967116	1.991232445925916	3.11	11.18
88	22	1.99524744	1.991232445940219	2.70	12.26
96	24	1.98657823	1.991232445939061	2.63	13.55
104	26	1.99493548	1.991232445939134	2.73	14.07
112	28	1.98945221	1.991232445939121	3.05	14.78
120	30	1.99089148	1.991232445939101	3.77	14.09
∞		1.99123245	1.991232445939118		

$$s'_n = \mathcal{K}_{n-2\lfloor n/2 \rfloor}^{(\lfloor n/2 \rfloor)}(\{(n+1/2)^{-1}\}, \{\gamma_n^{(0)} = n+2, \gamma_n^{(1)} = -(2n+5)*x_\tau, \gamma_n^{(2)} = n+3\}, \{s_{\tau n}\}, \{(\tau n+1)^{-1}\})$$

Es stellt sich die Frage, ob man auch diese Verallgemeinerung auf den Fall von Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen übertragen kann. Dies kann in der Tat geschehen, wenn die Koeffizienten selbst wieder Produkte von oszillierenden Funktionen sind, wenn also Reihen von dem Typ

$$s = \sum_{n=0}^{\infty} \prod_{j=1}^K [a_n^{(j)} \phi_n^{(j)}(x^{(j)}) + b_n^{(j)} \psi_n^{(j)}(x^{(j)})] \quad (5.159)$$

vorliegen, wobei die Funktionen $\phi_n^{(j)}(x^{(j)})$ und $\psi_n^{(j)}(x^{(j)})$ die oben an $\phi_n(x)$ und $\psi_n(x)$ gestellten Bedingungen erfüllen, so daß Funktionen $\rho_n^{(j,\pm)}(x^{(j)}) = \phi_n^{(j)}(x^{(j)}) \pm i \psi_n^{(j)}(x^{(j)})$ existieren. Dazu ersetzt man mittels

$$\phi_n^{(j)}(x^{(j)}) = \frac{1}{2}[\rho_n^{(j,+)}(x^{(j)}) + \rho_n^{(j,-)}(x^{(j)})], \quad \psi_n^{(j)}(x^{(j)}) = \frac{1}{2i}[\rho_n^{(j,+)}(x^{(j)}) - \rho_n^{(j,-)}(x^{(j)})] \quad (5.160)$$

alle Funktionen $\phi_n^{(j)}(x^{(j)})$ und $\psi_n^{(j)}(x^{(j)})$, und erhält

$$s = \sum_{n=0}^{\infty} \prod_{j=1}^K \left[\frac{1}{2} \{a_n^{(j)} - i b_n^{(j)}\} \rho_n^{(j,+)}(x^{(j)}) + \frac{1}{2} \{a_n^{(j)} + i b_n^{(j)}\} \rho_n^{(j,-)}(x^{(j)}) \right]. \quad (5.161)$$

Ausmultiplizieren zeigt dann, daß man die Reihe s als Linearkombination von 2^K Reihen darstellen kann, deren Terme jeweils Produkte von Ausdrücken $(a_n^{(j)} \mp i b_n^{(j)})/2 \rho_n^{(j,\pm)}(x^{(j)})$

sind. Diese 2^K Reihen kann man nun einzeln extrapolieren, wobei einfachere Verfahren ausreichen. Der numerische Aufwand für das neue Extrapolationsverfahren ist relativ gering. Er beträgt das 2^K -fache des Aufwandes für diese einfacheren Verfahren. Falls insbesondere die Koeffizienten $a^{(j)}$ und $b^{(j)}$ glatt sind, bieten sich hier alle Verfahren an, mit denen man lineare oder logarithmische Konvergenz beschleunigen kann, so daß man auf die algorithmisch komplizierteren Verfahren wie die $d^{(m)}$ -Transformation mit $m > 1$ verzichten kann. Das Endergebnis ergibt sich dann durch Linearkombination der so gewonnenen Näherungen. Auch im Falle von Orthogonalentwicklungen bezeichnen wir diese Vorgehensweise als die *verallgemeinerte Methode der zugeordneten Reihen*.

Dies sei an einem Beispiel erläutert. Wir betrachten

$$\begin{aligned} s = G(\theta, \alpha) &= \sum_{j=0}^{\infty} \cos((j + 1/2)\alpha) P_j(\cos \theta) \\ &= \begin{cases} [2(\cos \alpha - \cos \theta)]^{-1/2} & \text{für } 0 \leq \alpha < \theta < \pi \\ 0 & \text{für } 0 < \theta < \alpha \leq \pi \end{cases} \end{aligned} \quad (5.162)$$

mit einer Singularität bei $\alpha = \theta$. Die Partialsummen sind

$$s_n = \sum_{j=0}^n \cos((j + 1/2)\alpha) P_j(\cos \theta) \quad (5.163)$$

Direkte Beschleunigung der reellen Reihe kann mit $d^{(4)}$ erfolgen, wohingegen im oben beschriebenen Verfahren von Sidi einerseits die Möglichkeit besteht, die Reihe als Fourier-Reihe

$$G(\alpha) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j \cos((j + 1/2)\alpha) \quad (5.164)$$

mit Koeffizienten $f_j = P_j(\cos \theta)$ aufzufassen und die zugeordneten Reihen

$$F_{\pm} = \sum_{j=0}^{\infty} f_j \exp(\pm i(j + 1/2)\alpha) \quad (5.165)$$

mit der $d^{(2)}$ -Transformation zu beschleunigen, oder andererseits, die Reihe als Entwicklung nach Legendre-Polynomen

$$G(\theta) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j P_j(\cos \theta) \quad (5.166)$$

aufzufassen mit den Koeffizienten $a_j = \cos((j + 1/2)\alpha)$ und die zugeordneten Reihen $A^{\pm}(\theta)$ und $B^{\pm}(\theta)$ zu extrapolieren, wozu wieder die $d^{(2)}$ -Transformation benötigt wird. In beiden Fällen kann man im Vergleich zur Verwendung der $d^{(4)}$ -Transformation die Zahl der für eine bestimmte Genauigkeit benötigten Koeffizienten der ursprünglichen Reihe etwa halbieren. [323]

Das hier neu eingeführte, verallgemeinerte Verfahren stellt die Reihe (5.162) als Summe $s = p_1 + p_2 + p_3 + p_4$ der vier Reihen

$$\begin{aligned} p_1 &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} \exp(i(j+1/2)\alpha) \rho_j^+(\theta), \\ p_2 &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} \exp(-i(j+1/2)\alpha) \rho_j^-(\theta), \\ p_3 &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} \exp(i(j+1/2)\alpha) \rho_j^-(\theta), \\ p_4 &= \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{4} \exp(-i(j+1/2)\alpha) \rho_j^+(\theta), \end{aligned} \quad (5.167)$$

mit

$$\rho_j^{\pm}(\theta) = P_j(\cos \theta) \pm i(2/\pi)Q_j(\cos \theta) \quad (5.168)$$

dar. Die vier Reihen kann man zum Beispiel mit der Levin-Transformation beschleunigen. Hierbei kann man in der Nähe der Singularität Frequenzvervielfachung einsetzen. Als Näherung ergibt sich so bei Frequenzvervielfachung mit τ

$$G_n^{(\tau)} = \sum_{j=1}^4 \mathcal{L}_n^{(0)}(1, [p_{j,\tau n}]|_{n=0}, [(\tau n + 1)(p_{j,\tau n} - p_{j,(\tau n)-1})]|_{n=0}) \quad (5.169)$$

mit den n -ten Partialsummen $p_{j,n}$, wobei die angegebenen Varianten der Levin-Transformation gleichbedeutend mit der Anwendung der $d^{(1)}$ -Transformation mit $R_l = \tau l$ sind. Der Wert $\tau = 1$ entspricht dem Verfahren ohne Frequenzvervielfachung.

Wie schneidet das neue Verfahren numerisch ab? Um den Vergleich mit den Verfahren von Sidi zu erleichtern, behandeln wir zwei Wertepaare (α, θ) , für die Sidi Ergebnisse angegeben hat [323, Tabellen 6,7], die mit einer Maschinengenauigkeit von etwa 33 Stellen erzielt wurden. Wir verwenden hier Maple mit Digits=32, was einen direkten Vergleich der Resultate erlaubt.

Im ersten Fall setzen wir $\alpha = \pi/6$ und $\theta = 2\pi/3$. Dies bedeutet einen relativ großen Abstand zur Singularität bei $\alpha = \theta$. Die entsprechenden Ergebnisse des neuen Verfahrens sind in Tabelle 5.42 dargestellt. Man sieht, daß die nicht extrapolierte Reihe langsam konvergiert. Verwendung des neuen Verfahrens liefert eine starke Konvergenzverbesserung: Um eine zusätzliche Stelle Genauigkeit zu gewinnen, muß man einen weiteren Koeffizienten der ursprünglich Reihe verwenden. Der Quotient Stellenzahl/(Zahl der Koeffizienten) ist also etwa Eins. Das von Sidi vorgeschlagene Verfahren unter Verwendung der $d^{(2)}$ -Transformation liefert [323, Tab. 6] nur etwa eine neue Stelle für je zwei weitere Koeffizienten, der entsprechende Quotient ist also nur etwa 1/2. Für vorgegebene Genauigkeit benötigt das neue Verfahren also nur etwa die Hälfte der Koeffizienten wie das von Sidi vorgeschlagene Verfahren.

Im zweiten Fall setzen wir $\alpha = 0.6\pi$ und $\theta = 2\pi/3$. Dies ist schon ziemlich nahe an der Singularität bei $\alpha = \theta$. Deshalb wird $\tau = 10$ gewählt, was auch den Vergleich zu den Ergebnissen von Sidi mit $R_l = 10l$ erlaubt [323, Tab. 7]. Die entsprechenden

Tabelle 5.42: Beschleunigung der Reihe (5.162) durch Rückführung auf vier komplexe Reihen für $\alpha = \pi/6$ und $\theta = 2\pi/3$

n	$-\lg (s_n - s)/s $	$-\lg (G_n^{(1)} - s)/s $
6	0.8	6.4
8	1.8	9.1
10	1.3	10.5
12	0.9	12.3
14	1.9	14.5
16	1.4	17.2
18	1.0	18.4
20	1.9	20.3
22	1.5	22.6
24	1.1	24.7
26	2.0	26.3
28	1.5	28.3
30	1.1	30.2

Ergebnisse des neuen Verfahrens sind in Tabelle 5.43 dargestellt. Man sieht, daß die nicht extrapolierte Reihe noch langsamer konvergiert als im vorigen Fall. Der Wert zu $n = 30$ entspricht s_{300} , und die Genauigkeit ist geringer als zwei Stellen. Verwendung des neuen Verfahrens liefert wieder eine starke Konvergenzverbesserung: Um eine zusätzliche Stelle Genauigkeit zu gewinnen, muß man im Mittel etwas weniger als einen weiteren Term der frequenzvervielfachten Reihe verwenden. Man erhält beispielsweise etwa 21 Stellen für $10 \cdot 19 + 1 = 191$ Koeffizienten sowie etwa 27 Stellen für 241 Koeffizienten der ursprünglichen Reihe. Der Quotient Stellenzahl/(Zahl der Koeffizienten der ursprünglichen Reihe) ist also etwa 0.11. Das von Sidi vorgeschlagene Verfahren unter Verwendung der $d^{(2)}$ -Transformation liefert laut Tab. 7 aus [323] nur etwa eine neue Stelle für je zwei weitere Koeffizienten der frequenzvervielfachten Reihe. Man erhält beispielsweise durch die Anwendung der $d^{(2)}$ -Transformation auf die komplexe Legendre-Reihe nach dem Vorschlag von Sidi 21 Stellen aus 482 Koeffizienten sowie 27 Stellen aus 642 Koeffizienten der ursprünglichen Reihe [323, Tab. 7], der Quotient Stellenzahl/(Zahl der Koeffizienten der ursprünglichen Reihe) ist also nur etwa 0.04. Für vorgegebene Genauigkeit benötigt das neue Verfahren also in diesem Fall nur etwa 35-40% der Koeffizienten, die in dem von Sidi vorgeschlagenen Verfahren auf der Basis der $d^{(2)}$ -Transformation berechnet werden müssen.

Zusammenfassend kann man für dieses Beispiel sagen, daß für vorgegebene Genauigkeit das neue Verfahren etwa die Hälfte der Koeffizienten benötigt wie das $d^{(2)}$ -Verfahren auf der Grundlage der komplexen Legendre-Reihen, und etwa ein Viertel der Koeffizienten wie das $d^{(4)}$ -Verfahren auf der Grundlage der reellen Reihe selbst. Der numerische Aufwand für

Tabelle 5.43: Beschleunigung der Reihe (5.162) durch Rückführung auf vier komplexe Reihen für $\alpha = 0.6\pi$ und $\theta = 2\pi/3$ mit Frequenzvervielfachung auf $\tau = 10$

n	$-\lg (s_{\tau n} - s)/s $	$-\lg (G_n^{(\tau)} - s)/s $
6	1.0	6.4
8	1.3	7.7
10	0.9	11.4
12	1.2	14.0
14	1.4	15.8
16	1.0	18.1
18	1.3	20.3
20	1.5	22.6
22	1.1	24.9
24	1.3	27.3
26	1.6	29.7
28	1.2	31.2
30	1.4	29.9

das neue Verfahren ist in diesem Fall das Vierfache des Aufwandes für eine entsprechende Levin-Transformation einer komplexen Reihe.

Wir bemerken nochmals, daß man bei der verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen statt der Levin-Transformation auch andere Transformationen wie den ϵ -Algorithmus oder die \mathcal{J} -Transformation verwenden kann.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die (neu eingeführte) verallgemeinerte Methode der zugeordneten Reihen, gegebenenfalls in Kombination mit Frequenzvervielfachung, ein sehr leistungsfähiges Verfahren zur Extrapolation von Orthogonalentwicklungen darstellt.

Kapitel 6

Störungstheoretische Methoden

In den vorangegangenen Abschnitten wurden Methoden diskutiert, die relativ allgemein hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit waren. Dabei wurde Wert darauf gelegt, daß die Verfahren flexibel waren, um an verschiedene Problemklassen anpaßbar zu sein. Dies konnte man zum Beispiel durch die Einführung von zusätzlichen Hilfsfolgen erreichen, die Informationen über das asymptotische Verhalten der Reste und — im Falle der \mathcal{J} -Transformation — problemadaptierte Hierarchien einzubringen erlauben. Sehr häufig kann man damit schon ausgezeichnete Ergebnisse erzielen, wobei für gute Extrapolation oft größenordnungsmäßig 20-30 Zahlenwerte hinreichen.

In der Praxis gibt es allerdings auch den Fall, daß die Berechnung eines weiteren Elementes der zu extrapolierenden Folge immer aufwendiger wird und man daher mit wenigen Zahlenwerten auskommen muss.

Ein Beispiel dafür ist die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie. Zu lösen ist eine Schrödinger-Gleichung

$$H\psi = E\psi, \quad (6.1)$$

wobei der Hamilton-Operator $H = H_0 + \beta V$ in einen ungestörten Hamilton-Operator H_0 mit bekanntem Spektrum (Eigenfunktionen, Eigenwerte) und eine Störung V zerlegt wird. Die Störungsreihen von Eigenfunktionen ψ und Eigenwerten E werden als Potenzreihen im Kopplungsparameter β angenommen, und die Schrödinger-Gleichung wird Ordnung für Ordnung durch Koeffizientenvergleich in β gelöst. Am Ende der Rechnung wird der Kopplungsparameter dann gleich Eins gesetzt. Die Approximation der Gesamtenergie E durch Partialsummen der Störungsreihe

$$E = E_0 + E_1 + E_2 + E_3 + E_4 + E_5 + \dots, \quad (6.2)$$

also die Verwendung der Gesamtenergie n -ter Ordnung

$$E^{(n)} = \sum_{j=0}^n E_j \quad (6.3)$$

als Approximation des Energieeigenwertes, nutzt den Informationsgehalt der energetischen Beiträge E_j in j -ter Ordnung nicht optimal aus. Extrapolationsverfahren erlauben eine effizientere Berechnung von E aus den energetischen Beiträgen E_i .

Die Störungsreihe für die Energie eines quantenmechanischen Systems ist für hohe Ordnungen immer schwieriger zu berechnen. Dies erklärt, warum es relativ wenige Systeme gibt, bei der es bisher möglich war, störungstheoretische Resultate hoher Ordnungen zu erhalten.

Das starke Anwachsen des numerischen Aufwandes ist insbesondere für die Vielteilchenstörungstheorie bedeutsam. Dort kann man für kleinere Systeme mit *ab initio* Programmen Rechnungen bis zur vierten oder fünften Ordnung durchführen, während Rechnungen höherer Ordnung nur sehr selten durchgeführt werden können. Folglich stehen in der Regel nicht mehr als fünf bis sechs Zahlen (die energetischen Beiträge E_i , $i = 0, \dots, 4(, 5)$ der verschiedenen Ordnungen) zur Verfügung. Diese kleine Zahl von Werten schränkt die Zahl der mit gutem Erfolg auf dieses Problem anwendbaren Verfahren stark ein. Von den auch im mathematischen Bereich häufiger angewandten Verfahren bietet sich eigentlich nur die Verwendung von Padé-Approximationen [14, 16, 17] an, die in enger Beziehung zum ϵ -Algorithmus [399] stehen.

Hier stellt sich nun die Frage nach speziellen Verfahren, die an die störungstheoretische Natur des Problems direkt angepaßt sind. Wir werden im folgenden zwei derartige Verfahren besprechen, wobei nur allgemeine Eigenschaften der Störungstheorie zugrundegelegt werden, und hinsichtlich einiger mathematischer Eigenschaften charakterisieren. Die Resultate der Anwendung dieser Extrapolationsverfahren auf die Vielteilchenstörungstheorie werden in einem späteren Kapitel besprochen. Der vorliegende Abschnitt stützt sich auf [165].

6.1 Goldhammer-Feenberg- und Feenberg-Reihe

Goldhammer und Feenberg [111, 132] haben¹ vorgeschlagen, den Hamilton-Operator H dadurch neu zu zerlegen, daß man den ungestörten Hamilton-Operator H_0 mit einem konstanten Faktor gemäß

$$H_0(\alpha) = (1 - \alpha)H_0 \quad (6.4)$$

renormiert. Dies nennen wir im folgenden die *Feenberg-Skalierung*. Kennt man das Spektrum von H_0 , so ist natürlich auch das Spektrum von $H_0(\alpha)$ vollständig bekannt, so daß man problemlos eine Störungstheorie auf $H_0(\alpha)$ aufbauen kann. Für den gesamten Hamilton-Operator erhält man die Zerlegung

$$H = H_0(\alpha) + V(\alpha), \quad V(\alpha) = V + \alpha H_0. \quad (6.5)$$

Diese Zerlegung führt zu einer renormierten Störungsreihe

$$E(\alpha) = E_0(\alpha) + E_1(\alpha) + E_2(\alpha) + E_3(\alpha) + E_4(\alpha) + E_5(\alpha) + \dots \quad (6.6)$$

¹Sie verwendeten ursprünglich die Brillouin-Wigner-Störungstheorie. Der Vorschlag läßt sich selbstverständlich auch für die Rayleigh-Schrödinger-Störungstheorie verwenden.

mit Partialsummen — also renormierten Gesamtenergien n -ter Ordnung —

$$E^{(n)}(\alpha) = \sum_{j=0}^n E_j(\alpha). \quad (6.7)$$

Diese hängen von renormierten Beiträgen j -ter Ordnung $E_j(\alpha)$ ab, die durch [111, Eq. (12)]

$$\begin{aligned} E_0(\alpha) &= (1 - \alpha)E_0, & E_1(\alpha) &= E_1 + \alpha E_0, \\ E_n(\alpha) &= \frac{1}{(1 - \alpha)^{n-1}} \sum_{j=2}^n \binom{n-2}{j-2} (-\alpha)^{n-j} E_j, & (n \geq 2) \end{aligned} \quad (6.8)$$

gegeben sind. Für die Berechnung dieser renormierten Beiträge bis zur n -ten Ordnung sind bei bekanntem α demnach nur die energetischen Beiträge E_j mit $0 \leq j \leq n$ erforderlich. Es sei außerdem bemerkt, daß für $n > 2$ der energetische Beitrag $E_n(\alpha)$ bis auf den Faktor $(1 - \alpha)^{1-n}$ ein Polynom $(n - 2)$ -ten Grades ist.

In erster Ordnung ist die Gesamtenergie invariant unter der Feenberg-Skalierung, weil $E^{(1)}(\alpha) = E^{(1)}$ gilt. In zweiter Ordnung gilt

$$E^{(2)}(\alpha) = E^{(1)} + E_2/(1 - \alpha). \quad (6.9)$$

Die Funktion $E^{(2)}(\alpha)$ hat also einen Pol bei $\alpha = 1$ und nimmt alle reellen Werte an, wenn α die reellen Zahlen durchläuft. Die ursprüngliche Zerlegung entspricht $\alpha = 0$ und ist für $E^{(2)}(\alpha)$ in keiner Weise ausgezeichnet.

Es stellt sich die Frage, wie der Parameter α zu wählen ist, um für gegebene Ordnung $n > 2$ der Störungsreihe eine möglichst gute Approximation $E^{(n)}(\alpha)$ der Gesamtenergie zu erhalten. Die entscheidende Beobachtung dazu ist, daß der exakte Wert der Gesamtenergie selbstverständlich nur von H abhängt, nicht aber von der gewählten Zerlegung in gestörten und ungestörten Anteil. Dies legt nahe, den Wert von α so zu bestimmen, daß die Approximation $E^{(n)}(\alpha)$ möglichst wenig von α abhängt, also stationär ist bezüglich einer Variation von α . Für $n = 2$ versagt diese Vorgehensweise übrigens, da $E^{(2)}(\alpha)$ keinen stationären Punkt für endliche α hat. Die Stationarität kann man durch die Forderung

$$0 = \frac{dE^{(n)}}{d\alpha}(\alpha^{(n)}), \quad \frac{dE^{(n)}}{d\alpha}(\alpha) = (n - 1) E_n(\alpha)/(1 - \alpha), \quad (n > 2) \quad (6.10)$$

an den optimalen Wert $\alpha = \alpha^{(n)}$ bezüglich der Gesamtenergie n -ter Ordnung erreichen. Der angegebene Zusammenhang zwischen der Ableitung der Gesamtenergie n -ter Ordnung nach α und dem energetischen Beitrag E_n ergibt sich dabei durch explizite Rechnung. Ist der optimale Wert bekannt, so erhält man die entsprechende *Goldhammer-Feenberg-Energie n -ter Ordnung* gemäß

$$GF_n = E^{(n)}(\alpha^{(n)}). \quad (6.11)$$

Wir halten fest, daß sich für $n > 2$ der optimale Wert $\alpha^{(n)}$ in n -ter Ordnung als Nullstelle eines Polynoms $(n - 2)$ -ten Grades mit reellen Koeffizienten bestimmen läßt. Folglich gibt es für $n > 3$ mehr als eine Lösung für $\alpha^{(n)}$, nämlich $(n - 2)$ optimale α -Werte,

und demnach auch ebensoviele Goldhammer-Feenberg-Energien. Ist $n > 2$ ungerade, so ist der Polynomgrad ungerade und damit die Existenz mindestens einer reellen Lösung für α garantiert. Die entsprechende Goldhammer-Feenberg-Energie ist dann auch reell. Unter den anderen Lösungen können Paare von komplex-konjugierten Lösungen auftreten, zu denen im allgemeinen Paare von komplex-konjugierten Goldhammer-Feenberg-Energien gehören. Diese sind nicht sinnvoll, wenn man gebundene Zustände betrachtet, können aber für die Beschreibung von ungebundenen Zuständen (z.B. Resonanzen beim Stark-Effekt) eine Rolle spielen.

Die Stationarität der Gesamtenergie n -ter Ordnung ist verwandt mit dem Konzept der ordnungsabhängigen Abbildung (order-dependent mapping) [12, Sec. 18].

Keine Probleme mit Vieldeutigkeit und/oder komplexen Lösungen gibt es für $n = 3$. In diesem Fall gilt

$$\alpha^{(3)} = E_3/E_2. \quad (6.12)$$

Wenn man approximativ annimmt, daß sich die energetischen Beiträge wie in einer geometrischen Progression verhalten, daß also $E_j = E_0 q^j$ gilt, dann folgt für $n > 1$

$$E_n(\alpha) = E_0 q^2 (1 - \alpha)^{1-n} (q - \alpha)^{n-2}, \quad (6.13)$$

und die Gesamtenergie $E^{(n)}(\alpha)$ ist stationär für $\alpha = q$ für alle $n > 2$. In diesem Falle könnte man also in jeder Ordnung denselben Wert von α benutzen, den man auch als Quotient E_3/E_2 berechnen könnte. Für diesen Fall erhält man über die Stationaritätsbedingung übrigens das exakte Resultat $E^{(n)}(q) = E_0/(1 - q)$ für alle $n \geq 2$.

Daher ist die sogenannte *Feenberg-Reihe* [307], deren Partialsummen über

$$F_n = E^{(n)}(\alpha^{(3)}) = E^{(n)}(E_3/E_2) \quad (6.14)$$

definiert sind, ein Spezialfall der sogenannten *Geometrischen Approximation* [6, 31, 308, 393]. Ähnlich wie der ursprüngliche Zugang von Goldhammer and Feenberg [132, 111] erfordert die Berechnung der Feenberg-Reihe nur die Terme E_j der ursprünglichen Störungsreihe. Explizit gilt

$$F_3 = E_0 + E_1 + E_2^2/(E_2 - E_3), \quad (6.15)$$

was mit der Padé-Approximation [2/1] übereinstimmt, sowie

$$F_4 = E_0 + E_1 + \frac{E_2}{1 - \frac{E_3}{E_2}} + \frac{E_4}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^3} - \frac{E_3^2}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^3 E_2} \quad (6.16)$$

und

$$\begin{aligned} F_5 = E_0 + E_1 + \frac{E_2}{1 - \frac{E_3}{E_2}} + \frac{E_4}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^3} - \frac{E_3^2}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^3 E_2} \\ + \frac{E_5}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^4} - 3 \frac{E_3 E_4}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^4 E_2} + 2 \frac{E_3^3}{\left(1 - \frac{E_3}{E_2}\right)^4 E_2^2}. \end{aligned} \quad (6.17)$$

Außerdem gilt $F_3 = GF_3$.

Für $n = 4$ ergeben sich zwei Goldhammer-Feenberg-Energien. Diese sind allerdings in allen von uns betrachteten Anwendungen komplex-konjugiert. Ihr Mittelwert ist reell und wird im folgenden als GF4b bezeichnet.

Für $n = 5$ gibt es stets eine reelle Goldhammer-Feenberg-Energie

$$\begin{aligned}
GF_5 = & E_0 + E_1 - \frac{1}{2} \frac{\sqrt{A}}{C^4 E_2} + \frac{E_4}{C^2 B} + \frac{E_3^3}{C^4 E_2^2} - \frac{E_2 B}{C^2} \\
& - \frac{E_3^6}{C^4 E_2^5 B^3} + \frac{E_4^3}{C^4 E_2^2 B^3} + 3 \frac{E_3^4 E_4}{C^4 E_2^4 B^3} \\
& - 3 \frac{E_3^2 E_4^2}{C^4 E_2^3 B^3} - \frac{3 E_4 E_3}{2 C^4 E_2} + \frac{E_3^4}{C^3 E_2^3 B^2} \\
& - 2 \frac{E_3^2 E_4}{C^3 E_2^2 B^2} + \frac{E_4^2}{C^3 E_2 B^2} + \frac{E_2}{C} - \frac{E_4}{C^3} \\
& + \frac{1}{2} \frac{E_5}{C^4} - \frac{E_3^2}{C^2 E_2 B} + \frac{E_3^2}{C^3 E_2} + \frac{E_2 B^2}{C^3}
\end{aligned} \tag{6.18}$$

$$A = -3 E_3^2 E_4^2 + 4 E_2 E_4^3 - 6 E_3 E_2 E_4 E_5 + E_5^2 E_2^2 + 4 E_5 E_3^3$$

$$B = \left(-\frac{3 E_4 E_3}{2 E_2^2} + \frac{1 E_5}{2 E_2} + \frac{E_3^3}{E_2^3} + \frac{1}{2} \frac{\sqrt{A}}{E_2^2} \right)^{1/3}$$

$$C = 1 - B - \frac{E_3^2}{E_2^2 B} + \frac{E_4}{E_2 B} - \frac{E_3}{E_2}$$

(als Nullstelle eines reellen, kubischen Polynoms).

Den Mittelwert der anderen beiden, in den betrachteten Anwendungen stets komplex-konjugierten Energien nennen wir GF5b. Dies ist stets eine reelle Größe.

Wir betrachten als einfaches Beispiel den Hamilton-Operator

$$H = p^2 + (1 + \lambda)x^2 \tag{6.19}$$

eines eindimensionalen, harmonischen Oszillators mit Grundzustandsenergie

$$E = \sqrt{1 + \lambda} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1/2)_j}{j!} (-\lambda)^j \tag{6.20}$$

für $|\lambda| < 1$. Aus der angegebenen Taylor-Reihe in λ liest man für die Zerlegung

$$H_0 = p^2 + x^2 \quad V = \lambda x^2 \tag{6.21}$$

die energetischen Beiträge

$$E_j = \frac{(-1/2)_j}{j!} (-\lambda)^j \tag{6.22}$$

ab.

Dann ergibt sich $F_4 = F_5 = GF_5$, da E_3/E_2 auch Nullstelle von $E_5(\alpha)$ ist. Außerdem gilt

$$\begin{aligned}
E^{(4)} - E &= -\frac{7}{256}\lambda^5 + \frac{21}{1024}\lambda^6 - \frac{33}{2048}\lambda^7 + O(\lambda^8) \\
GF4b - E &= \frac{5}{2048}\lambda^6 - \frac{25}{4096}\lambda^7 + O(\lambda^8) \\
E^{(5)} - E &= \frac{21}{1024}\lambda^6 - \frac{33}{2048}\lambda^7 + O(\lambda^8) \\
GF_5 - E &= \frac{1}{1024}\lambda^6 - \frac{5}{2048}\lambda^7 + O(\lambda^8) \\
GF5b - E &= -\frac{7}{2048}\lambda^6 + \frac{35}{4096}\lambda^7 + O(\lambda^8)
\end{aligned} \tag{6.23}$$

Man sieht also, daß für dieses Beispiel die führende Ordnung des Fehlers beim Übergang von $E^{(4)}$ zu F_4 bzw. $GF4b$ ganz eliminiert wird und der Fehler in der folgenden Ordnung λ^6 um den Faktor 21 bzw. 8.4 reduziert wird. Vergleicht man $E^{(5)}$ mit GF_5 bzw. $GF5b$, so wird der Fehler in führender Ordnung jeweils deutlich reduziert.

Abschließend soll noch der Einfluß eines konstanten Faktors c untersucht werden, mit dem alle Terme der ursprünglichen Störungsreihe multipliziert werden, gemäß $E_j \rightarrow c E_j$ für alle j . Aus der Definition sieht man sofort, daß dann auch $E_j(\alpha) \rightarrow c E_j(\alpha)$ für alle j und folglich auch $E^{(n)}(\alpha) \rightarrow c E^{(n)}(\alpha)$ für jeden festen Wert von α gilt. Damit bleiben alle Extrema von $E^{(n)}(\alpha)$ bzw. Nullstellen von $E_n(\alpha)$ invariant, also $\alpha^{(n)} \rightarrow \alpha^{(n)}$. Damit folgt $F_n \rightarrow c F_n$ und $GF_n \rightarrow c GF_n$ für alle Feenberg- und Goldhammer-Feenberg-Energien. Faßt man diese als Funktion der Terme E_j der ursprünglichen Störungsreihe auf, so kann man also

$$F_n(c E_0, \dots, c E_n) = c F_n(E_0, \dots, E_n) \tag{6.24}$$

und

$$GF_n(c E_0, \dots, c E_n) = c GF_n(E_0, \dots, E_n) \tag{6.25}$$

schreiben, wobei man im Falle der Goldhammer-Feenberg-Energien dieselbe Nullstelle $\alpha^{(n)}$ verwendet.

6.2 Effektive charakteristische Polynome

Die Methode der effektiven charakteristischen Polynome wurde von Čížek und Mitarbeitern eingeführt und auf die Berechnung der Korrelationsenergie von Modellsystemen angewandt [42, 43, 44, 45, 77, 101, 346] sowie für die Summation der Störungsreihe anharmonischer Oszillatoren verwendet [79].

In der linearen Variationsmethode mit n orthonormalen Basisfunktionen $\{\phi_j\}_{j=1}^n$ für den Hamilton-Operator H tritt das charakteristische Polynom $P_n(E)$ vom Grade n in der unbekanntenen Energie E auf:

$$P_n(E) = \det |\langle \phi_j | H | \phi_k \rangle - E \delta_{j,k}| . \quad (6.26)$$

Gilt $H = H_0 + \beta V$, so hat dieses Polynom die Struktur [79, Eq. (3.2)]

$$P_n(E) = \sum_{j=0}^n E^j \sum_{k=0}^{n-j} f_{n,j,k} \beta^k \quad (6.27)$$

mit $f_{n,n,0} = 1$. Es hängt also von $N = n(n+3)/2$ Koeffizienten $f_{n,j,k}$ ab, die zu bestimmen sind, wenn man Approximationen für die Energie berechnen will. Kennt man alle Operatoren und Basisfunktionen, so kann man die Koeffizienten über Matrixelemente von H_0 und V berechnen. In der Methode des effektiven charakteristischen Polynomes werden diese Koeffizienten stattdessen aus den Termen von Störungsreihen berechnet.

Wir betrachten den Fall, daß man die Störungsreihe eines nichtentarteten Eigenwertes bezüglich einer bestimmten Zerlegung von $H = H_0 + \beta V$ betrachtet. Die Störungsreihe für E ist dann durch

$$E = \sum_{j=0}^{\infty} E_j \beta^j \quad (6.28)$$

gegeben. Setzt man Gl. (6.28) in Gl. (6.27) ein und macht eine Taylor-Entwicklung in β , so erhält man ein Resultat der Form

$$P_n \left(\sum_{j=0}^{\infty} E_j \beta^j \right) = \sum_{k=0}^{N-1} A_k \beta^k + O(\beta^N) . \quad (6.29)$$

Die A_k hängen von den $f_{n,j,k}$ ab. Da $P_n(E) = 0$ für einen Eigenwert E gelten muß, fordert man

$$P_n(E_0 + \beta E_1 + \beta^2 E_2 + \dots) = O(\beta^N) \quad (6.30)$$

bzw.

$$A_k = 0, \quad 0 \leq k \leq N-1 . \quad (6.31)$$

Dies ergibt ein lineares Gleichungssystem für die unbekanntenen Koeffizienten $f_{n,j,k}$. Daraus werden nun die Koeffizienten bestimmt. Damit ist das effektive charakteristische Polynom $P_n(E)$ vollständig bestimmt. Approximationen für den Energieeigenwert E erhält man nun als Lösung der effektiven Säkulargleichung $P_n(E) = 0$. Schließlich setzt man noch gegebenenfalls $\beta = 1$.

Wenn nur wenige Terme der Störungsreihe bekannt sind, ist der Grad des effektiven charakteristischen Polynomes notwendigerweise klein. Für Polynomgrad $n = 2$ sind fünf Koeffizienten zu bestimmen. Dafür reichen die Terme E_0, \dots, E_4 der Störungsreihe aus. Verfährt man wie oben beschrieben, so erhält man als explizite Lösung der effektiven Säkulargleichung $P_2(E) = 0$ den Ausdruck

$$\Pi_2 = E_0 + E_1 + \frac{E_2^2}{2} \frac{E_2 - E_3 + \sqrt{(E_2 - E_3)^2 - 4(E_2 E_4 - E_3^2)}}{E_2 E_4 - E_3^2} \quad (6.32)$$

Eine weitere Lösung — mit einem Minuszeichen vor der Quadratwurzel — ergibt für kleine β nur dann das korrekte Ergebnis, wenn $E_2 > 0$ gilt, was bekanntlich in Störungsreihen für die Grundzustandsenergie physikalischer Systeme nicht auftreten kann.

Explizite Rechnung zeigt, daß diese Approximation für die Energie invariant unter einer Feenberg-Skalierung von H_0 ist. Es gilt

$$\Pi_2(E_0, \dots, E_4) = \Pi_2(E_0(\alpha), \dots, E_4(\alpha)). \quad (6.33)$$

Da das echte charakteristische Polynom nur vom gesamten Hamilton-Operator abhängt und damit invariant unter der Feenberg-Skalierung ist, ist zu vermuten, daß die Invarianz nicht nur für Π_2 , der Approximation auf der Basis des effektiven charakteristischen Polynomes zweiten Grades, sondern auch für Approximationen auf der Basis von effektiven charakteristischen Polynomen höheren Grades gilt.

Multiplikation aller Terme der Störungsreihe mit einem konstanten Faktor gemäß $E_j \rightarrow c E_j$ führt zur Multiplikation von Π_2 mit diesem Faktor, also $\Pi_2 \rightarrow c \Pi_2$. Dies kann man auch als

$$\Pi_2(c E_0, \dots, c E_4) = c \Pi_2(E_0, \dots, E_4) \quad (6.34)$$

schreiben.

Betrachten wir nun das Beispiel aus dem letzten Abschnitt. Setzt man die Terme E_j aus Gl. (6.22) in die Formel für Π_2 ein, so folgt

$$\Pi_2 = \sqrt{1 + \lambda}, \quad (6.35)$$

also das exakte Resultat für die Grundzustandsenergie des harmonischen, eindimensionalen Oszillators $H = p^2 + (1 + \lambda)x^2$. Für dieses Beispiel ist demnach das effektive charakteristische Polynom niedrigsten Grades der Verwendung der Feenberg-Reihe und der Goldhammer-Feenberg-Approximation überlegen.

Es gibt es noch weitere denkbare Vorgehensweisen. Wie Čížek und Mitarbeiter gezeigt haben, kann man zur Berechnung des effektiven charakteristischen Polynoms Informationen aus Störungsentwicklungen für kleine Kopplungskonstanten mit solchen für große Kopplungskonstanten miteinander kombinieren. Betrachtet werden dabei jeweils Entwicklungen für einen einzigen Eigenwert.

Es ist aber auch möglich, Störungsreihen für kleine Kopplungskonstanten von mehreren verschiedenen Eigenwerten zu betrachten. Dies wird in Anhang E demonstriert für den Fall, daß man die Störungsreihen $\sum_j E_{1,j} \beta^j$ und $\sum_j E_{2,j} \beta^j$ für zwei nichtentartete Energieeigenwerte zur Bestimmung von $P_2(E)$ benutzt. In diesem Fall werden die Terme bis einschließlich der zweiten Ordnung einer ersten Störungsreihe und bis einschließlich der ersten Ordnung einer zweiten Störungsreihe verwendet. Dann zeigt sich, daß die beiden Nullstellen dieses effektiven charakteristischen Polynomes durch

$$\begin{aligned} \tilde{E}_1 = & \frac{1}{2} E_{2,0} + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} + \frac{1}{2} E_{1,1} - \frac{1}{2} (E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} \\ & + 2 E_{2,0} E_{2,1} - 2 E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 - 2 E_{1,0} E_{2,1} \\ & + 2 E_{1,0} E_{1,1} + E_{2,1}^2 - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 - 4 E_{1,2} E_{2,0} \\ & + 4 E_{1,0} E_{1,2})^{1/2} \end{aligned} \quad (6.36)$$

und

$$\begin{aligned} \tilde{E}_2 = & \frac{1}{2} E_{2,0} + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} + \frac{1}{2} E_{1,1} + \frac{1}{2} \left(E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} \right. \\ & + 2 E_{2,0} E_{2,1} - 2 E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 - 2 E_{1,0} E_{2,1} \\ & + 2 E_{1,0} E_{1,1} + E_{2,1}^2 - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 - 4 E_{1,2} E_{2,0} \\ & \left. + 4 E_{1,0} E_{1,2} \right)^{1/2} \end{aligned} \quad (6.37)$$

gegeben sind, durch die man die beiden gesuchten Eigenwerte näherungsweise bestimmen kann.

Anstelle der Terme der Ordnung bis einschließlich β^4 einer Störungsreihe kann man demnach auch die Terme der Ordnung bis einschließlich β^2 einer Störungsreihe sowie Terme der Ordnung bis einschließlich β einer zweiten Störungsreihe benutzen, um ein effektives charakteristisches Polynom zweiten Grades abzuleiten.

Abschließend betrachten wir dazu wieder ein Beispiel. Wendet man das oben beschriebene Verfahren auf die untersten beiden Eigenwerte des harmonischen Oszillators (6.19) an, so gilt

$$E_{1,0} = 1, \quad E_{1,1} = \frac{1}{2} \lambda, \quad E_{1,2} = -\frac{1}{8} \lambda^2 \quad (6.38)$$

und

$$E_{2,0} = 3, \quad E_{2,1} = \frac{3}{2} \lambda. \quad (6.39)$$

Damit ergibt sich

$$\tilde{E}_1 = 2 + \lambda - \frac{1}{2} \sqrt{4 + 4\lambda + 2\lambda^2}, \quad (6.40)$$

$$\tilde{E}_2 = 2 + \lambda + \frac{1}{2} \sqrt{4 + 4\lambda + 2\lambda^2} \quad (6.41)$$

Taylor-Entwicklung führt auf

$$\tilde{E}_1 = 1 + \frac{1}{2} \lambda - \frac{1}{8} \lambda^2 + \frac{1}{16} \lambda^3 - \frac{3}{128} \lambda^4 + \frac{1}{256} \lambda^5 + O(\lambda^6), \quad (6.42)$$

$$\tilde{E}_2 = 3 + \frac{3}{2} \lambda + \frac{1}{8} \lambda^2 - \frac{1}{16} \lambda^3 + \frac{3}{128} \lambda^4 - \frac{1}{256} \lambda^5 + O(\lambda^6). \quad (6.43)$$

Die wahren Eigenwerte dagegen haben die Taylor-Entwicklung

$$\sqrt{1 + \lambda} = 1 + \frac{1}{2} \lambda - \frac{1}{8} \lambda^2 + \frac{1}{16} \lambda^3 - \frac{5}{128} \lambda^4 + \frac{7}{256} \lambda^5 + O(\lambda^6), \quad (6.44)$$

$$3\sqrt{1 + \lambda} = 3 + \frac{3}{2} \lambda - \frac{3}{8} \lambda^2 + \frac{3}{16} \lambda^3 - \frac{15}{128} \lambda^4 + \frac{21}{256} \lambda^5 + O(\lambda^6). \quad (6.45)$$

Das zeigt, daß in diesem Beispiel für den ersten angeregten Zustand keine wesentliche Veränderung des Fehlers bei Verwendung der Näherung auf der Grundlage des effektiven charakteristischen Polynoms erzielt wird. Für den Grundzustand ist dies anders: Der Fehler der zweiten Ordnung Störungstheorie ist $O(\lambda^3)$, während der Fehler von \tilde{E}_1 von der Ordnung $O(\lambda^4)$ ist. Der Fehler verkleinert sich also durch Verwendung des effektiven charakteristischen Polynomes.

Kapitel 7

Bekannte Verfahren für Vektor- und Matrizenfolgen

In diesem Kapitel beschäftigen wir uns mit Extrapolationsverfahren für Vektor- und Matrizenfolgen, also Folgen von nichtskalaren Objekten, im Gegensatz zu Zahlenfolgen bzw. Folgen von Skalaren. Eine erschöpfende Darstellung ist nicht beabsichtigt. Einen Überblick über solche Verfahren vom mathematischen Standpunkt findet man in [59, Kap. 4,6]. Für weitergehende Informationen sei auch auf die Literatur verwiesen [47, 48, 49, 58, 61, 63, 64, 84, 124, 137, 138, 140, 149, 150, 185, 186, 220, 221, 227, 233, 242, 246, 251, 250, 252, 262, 267, 269, 270, 304, 305, 312, 313, 319, 320, 322, 325, 326, 330, 331, 394, 401].

In diesem Kapitel bezeichnen wir allgemein Folgeelemente mit lateinischen, dagegen Vektorkomponenten bzw. Matrixelemente mit griechischen Indizes. Außerdem identifizieren wir alle Vektoren mit Spaltenvektoren mit d Komponenten, also mit $d \times 1$ Matrizen, wobei d die Dimension des zugehörigen Vektorraumes \mathcal{V} ist. Damit können die üblichen Matrixoperationen wie Transponieren und Adjungieren durchgeführt werden. Ist also beispielsweise

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_d \end{pmatrix}, \quad (7.1)$$

so gilt

$$\begin{aligned} \vec{a}^T &= (a_1, a_2, \dots, a_d), \\ \vec{a}^\dagger &= (a_1^*, a_2^*, \dots, a_d^*). \end{aligned} \quad (7.2)$$

Damit kann man zum Beispiel das übliche Skalarprodukt zweier komplexer Vektoren \vec{a} und \vec{b} als $\vec{a}^\dagger \vec{b}$ schreiben. Außerdem kann man das symmetrische Produkt dieser Vektoren als die Zahl $\vec{a}^T \vec{b}$ definieren, das offensichtlich invariant unter Vertauschung von \vec{a} und \vec{b} ist und im Falle reeller Vektoren mit dem Skalarprodukt zusammenfällt. Sollen die Komponenten x_α eines Vektors \vec{x} verdeutlicht werden, so schreiben wir auch $\vec{x} = (x_\alpha)$. Analog wird die Kurzschreibweise $(A_{\alpha,\beta})$ für eine Matrix \mathbf{A} mit Komponenten $A_{\alpha,\beta}$ benutzt.

Matrizen kann man natürlich auch als Vektoren auffassen, indem man beispielsweise die Elemente einer $m \times n$ -Matrix mit den Komponenten eines $m \cdot n$ -dimensionalen Vektors in einer beliebigen, aber festen Reihenfolge identifiziert. Allerdings gibt es im Falle von quadratischen Matrizen auch Inverse, was andere Algorithmen möglich macht. Demnach sind alle Algorithmen, die wir unten für Vektorfolgen diskutieren, direkt auf Matrizenfolgen anwendbar.

7.1 Grundlagen

In der Praxis treten häufig nicht nur Zahlenfolgen mit langsamer Konvergenz auf, sondern auch langsam konvergierende Folgen von komplizierteren mathematischen Objekten, wie zum Beispiel Folgen von Vektoren und Matrizen.

Beispielsweise treten Folgen von Vektoren bei der iterativen Lösung von Systemen linearer oder nichtlinearer Gleichungen auf. Vektorfolgen sind auch wichtig bei der Lösung von gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen mit den Methoden der finiten Differenzen oder finiten Elementen. Ferner führen viele Verfahren zur Berechnung von Eigenwerten und -vektoren von Matrizen auf Vektor- und Matrizenfolgen.

Im Prinzip ist es möglich, die Extrapolationsverfahren für Zahlenfolgen komponentenweise anzuwenden, um auch Vektor- und Matrizenfolgen zu extrapolieren. Ist also \vec{v}_n eine Folge von Vektoren mit Komponenten $v_{n,\alpha}$ und ist $T : \{s_n\} \rightarrow \{s'_n\}$ irgendeine Transformation für Zahlenfolgen, wie wir sie in den vorangegangenen Kapiteln kennengelernt haben, so erhält man eine Transformation $\vec{T} : \{\vec{v}_n\} \rightarrow \{\vec{v}'_n\}$, indem man $v'_{n,\alpha} = T(v_{n,\alpha})$ für alle Komponenten setzt. Im Falle, daß die Algorithmen von Hilfsfolgen abhängen, gibt es, wie wir sehen werden, auch die Möglichkeit, in die Extrapolation der einzelnen Komponenten Informationen über das Verhalten der anderen Komponentenfolgen einfließen zu lassen. Diese komponentenweisen Algorithmen können durchaus erfolgreich sein.

Allerdings bieten speziell an die Vektor- bzw. Matrixnatur des Problems angepaßte Verfahren mehr Möglichkeiten. Man kann beispielsweise versuchen, Informationen bezüglich einer Komponentenfolge für die Extrapolation der anderen Komponentenfolgen auszunutzen.

Sehr häufig kann man Algorithmen für Zahlenfolgen, also *skalare* Algorithmen, relativ direkt auf Vektor- und Matrizenfolgen verallgemeinern. Hat man beispielsweise ein Folge s_n quadratischer Matrizen zu extrapolieren, kann man den ϵ -Algorithmus so anwenden, daß man alle Elemente $\epsilon_k^{(n)}$ der ϵ -Tafel als quadratische Matrizen $\epsilon_k^{(n)}$ interpretiert. Man erhält so den Matrixalgorithmus

$$\begin{aligned} \epsilon_{-1}^{(n)} &= 0, & \epsilon_0^{(n)} &= s_n, \\ \epsilon_{k+1}^{(n)} &= \epsilon_{k-1}^{(n+1)} + [\epsilon_k^{(n+1)} - \epsilon_k^{(n)}]^{-1}. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Man erkennt allerdings, daß man in jedem Schritt des Verfahrens Matrixinverse zu berechnen hat. Dies ist für kleine Matrizen durchaus akzeptabel, schon für mittelgroße Matrizen ist dies allerdings numerisch sehr aufwendig. Auf Besonderheiten bei der Berechnung

von Funktionen von quadratischen Matrizen mittels Extrapolationsverfahren werden wir später gesondert eingehen.

Im Falle von Vektoren und nichtquadratischen Matrizen ist man prinzipiell dadurch behindert, daß diese Objekte keine Inversen besitzen, so daß die auf rationalen Operationen beruhenden, skalaren Verfahren nicht direkt übertragen werden können.

Einen Ausweg aus beiden Problemen bietet die Verwendung von Pseudoinversen. Diese kann man auch für Vektoren definieren und erhält damit eine Möglichkeit, die skalaren Algorithmen auch mit gewissen Anpassungen auf Vektoren und Matrizen ausdehnen zu können.

Pseudoinverse werden im Abschnitt 7.1.1 besprochen. Im Anschluß daran werden wir Iterationsfolgen und ihre Extrapolation diskutieren.

Schließlich werden einige Besonderheiten bei der Berechnung von Funktionen von quadratischen Matrizen mittels Extrapolationsverfahren behandelt.

7.1.1 Pseudoinverse

Für Vektoren $\vec{v} \neq 0$ gibt es keine Inversen. Stattdessen kann man Pseudoinverse $\vec{P}(\vec{v})$ verschiedener Art einführen. Diese sollten bezüglich in einer geeignet gewählten binären Relation $\mu(\vec{a}, \vec{b})$ insofern Eigenschaften von Inversen haben, daß $\mu(\vec{v}, \vec{P}(\vec{v})) = 1$ gilt. Außerdem sollte für eindimensionale reelle Vektoren, also Zahlen v die Beziehung $P(v) = 1/v$ gelten.

Wir definieren

- Pseudoinverse bezüglich eines Skalarproduktes:

$$\vec{v}^- = \frac{\vec{v}}{\vec{v}^\dagger \vec{v}}. \quad (7.4)$$

Diese erfüllen

$$[\vec{v}^-]^\dagger \vec{v} = 1. \quad (7.5)$$

- Pseudoinverse bezüglich eines Skalarproduktes und eines weiteren Vektors $\vec{y} \neq 0$:

$$\vec{v}_-(\vec{y}) = \frac{\vec{y}}{\vec{v}^\dagger \vec{y}}. \quad (7.6)$$

Diese erfüllen

$$[\vec{v}_-(\vec{y})]^\dagger \vec{v} = \vec{v}^\dagger \vec{v}_-(\vec{y}) = 1. \quad (7.7)$$

Außerdem gilt für jeden Vektor \vec{a}

$$\vec{a}^\dagger \vec{v}_-(\vec{y}) \vec{v}^\dagger \vec{y} = \vec{a}^\dagger \vec{y} \quad (7.8)$$

sowie

$$\vec{y}^\dagger \vec{v} [\vec{v}_-(\vec{y})]^\dagger \vec{a} = \vec{y}^\dagger \vec{a}. \quad (7.9)$$

- Pseudoinverse bezüglich eines symmetrischen Produktes:

$$\vec{v}^{\sim} = \frac{\vec{v}}{\vec{v}^T \vec{v}}. \quad (7.10)$$

Diese erfüllen

$$\vec{v}^T \vec{v}^{\sim} = 1. \quad (7.11)$$

- Pseudoinverse bezüglich eines symmetrischen Produktes und eines weiteren Vektors $\vec{y} \neq 0$:

$$\vec{v}^{\sim}(\vec{y}) = \frac{\vec{y}}{\vec{v}^T \vec{y}}. \quad (7.12)$$

Diese erfüllen

$$\vec{v}^T \vec{v}^{\sim}(\vec{y}) = 1. \quad (7.13)$$

Außerdem gilt für jeden Vektor \vec{a}

$$\vec{a}^T \vec{v}^{\sim}(\vec{y}) \vec{v}^T \vec{y} = \vec{a}^T \vec{y}. \quad (7.14)$$

- Pseudoinverse bezüglich einer Norm $\|(\cdot)\|$

$$\vec{v}^I = \frac{\vec{v}}{\|\vec{v}\|^2}. \quad (7.15)$$

Diese erfüllen

$$\|\vec{v}^I\| = 1/\|\vec{v}\|. \quad (7.16)$$

Offensichtlich gilt $\vec{v}_-(\vec{v}) = \vec{v}^-$. Verwendet man bei einem Vektorraum mit Skalarprodukt als Norm $\|\vec{v}\| = \sqrt{\vec{v}^T \vec{v}}$, so gilt $\vec{v}^I = \vec{v}^-$. Man kann aber auch jede andere Norm verwenden. Im Falle reeller Vektoren fallen Skalarprodukt und symmetrisches Produkt zusammen, und es gelten die Gleichungen $\vec{v}^{\sim} = \vec{v}^-$ sowie $\vec{v}^{\sim}(\vec{y}) = \vec{v}_-(\vec{y})$.

Man beachte, daß man Pseudoinverse bezüglich eines Skalarproduktes in jedem Hilbert-Raum und Pseudoinverse bezüglich einer Norm in jedem Banach-Raum definieren kann. Die Konzepte sind damit auch direkt auf Funktionenräume anwendbar, wie sie in der Quantenmechanik häufig vorkommen.

Auch für Matrizen $\mathbf{A} \neq 0$ kann man verschiedene Varianten von Pseudoinversen verwenden. Wir definieren im Falle einer $m \times n$ Matrix \mathbf{A} :

- Linksinverses (falls $m \geq n$):

$$\mathbf{A}^L = (\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\dagger \quad (7.17)$$

Dann gilt

$$\mathbf{A}^L \mathbf{A} = \mathbf{1}_n \quad (7.18)$$

- Rechtsinverses (falls $m \leq n$):

$$\mathbf{A}^R = \mathbf{A}^\dagger (\mathbf{A} \mathbf{A}^\dagger)^{-1} \quad (7.19)$$

Es folgt

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^R = \mathbf{1}_m \quad (7.20)$$

- Pseudoinverses bezüglich der Spurnorm:

$$\mathbf{A}^{\text{tr}} = \frac{\mathbf{A}^\dagger}{\text{tr}(\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A})} \quad (7.21)$$

Damit folgt

$$\text{tr}(\mathbf{A} \mathbf{A}^{\text{tr}}) = \text{tr}(\mathbf{A}^{\text{tr}} \mathbf{A}) = 1 \quad (7.22)$$

- Pseudoinverses bezüglich einer Matrixnorm:

$$\mathbf{A}^{No} = \frac{\mathbf{A}^\dagger}{\|\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A}\|} \quad (7.23)$$

Dafür gilt

$$\|\mathbf{A}^{No} \mathbf{A}\| = 1 \quad (7.24)$$

Wir bemerken, daß es andere Matrizen als \mathbf{A}^L geben kann, die $\mathbf{A}^L \mathbf{A} = \mathbf{1}_n$ erfüllen. Diese werden auch als Linksinverse bezeichnet. Entsprechendes gilt für Rechtsinverse. Ferner ist die Nützlichkeit von \mathbf{A}^L und \mathbf{A}^R dadurch eingeschränkt, daß ihre Berechnung auf einer Matrixinversion beruht, die im Falle großer Matrizen zu hohem numerischem Aufwand führen kann.

Man kann noch weitere Pseudoinverse von Matrizen einführen, zum Beispiel durch Singulärwertzerlegungen (*Singular Value Decomposition, SVD*). Diese sind allerdings relativ aufwendig zu berechnen, weshalb sie im folgenden keine Verwendung finden.

Analoge Pseudoinverse kann man auch für lineare Abbildungen $\hat{A} : \mathcal{V}_1 \rightarrow \mathcal{V}_2$ zwischen allgemeinen Vektorräumen \mathcal{V}_j einführen, insbesondere für Operatoren auf Hilbert- oder Banach-Räumen.

7.1.2 Iterationsfolgen

Sehr häufig hat man in der Praxis Systeme von Gleichungen zu lösen. Sind diese linear, so stehen eine große Anzahl von Verfahren zur Verfügung, wobei sich insbesondere für große, dünn besiedelte Matrizen Iterationsverfahren anbieten. Diese haben meist die Struktur

$$\vec{x}_{n+1} = \mathbf{A} \vec{x}_n + \vec{b} \quad (7.25)$$

wobei \mathbf{A} eine quadratische Matrix ist. Für nichtlineare Gleichungen und Gleichungssysteme stellen Iterationsverfahren einen besonders wichtigen und konzeptionell einfachen Ansatz zur numerischen Lösung dar.

In diesem Abschnitt sollen Methoden diskutiert werden, wie man im Prinzip Extrapolationsverfahren auf Iterationsverfahren anwendet.

Wir betrachten generell Iterationsverfahren der Form

$$\vec{x}_{n+1} = \Phi_n(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n). \quad (7.26)$$

Hierbei ist \vec{x}_0 ein Startvektor aus dem Vektorraum \mathcal{V} , aus dem man durch sukzessive Anwendung der Iterationsfunktionen $\Phi_n : \mathcal{V}^{n+1} \rightarrow \mathcal{V}$ weitere Vektoren der Iterationsfolge \vec{x}_n berechnet. Hierbei bezeichnet $\mathcal{V}^{n+1} = \otimes_{j=1}^{n+1} \mathcal{V}$ das $(n+1)$ -fache Tensorprodukt von \mathcal{V} .

Ein besonders wichtiges Beispiel sind Iterationen mit Funktionen $\Phi : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ der Form

$$\vec{x}_{n+1} = \Phi(\vec{x}_n), \quad (7.27)$$

die zur Bestimmung eines Fixpunktes \vec{x}_* einer Funktion $\Psi : \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ gemäß

$$\vec{x}_* = \Psi(\vec{x}_*) \quad (7.28)$$

eingesetzt werden. Ist $\Phi = \Psi$, so spricht man von direkter Iteration, die auch als Picard-Iteration bezeichnet wird. Über die Fehler $\delta\vec{x}_n = \vec{x}_n - \vec{x}_*$ bei der direkten Iteration sind Aussagen möglich, wenn Ψ differenzierbar ist. Durch Taylor-Entwicklung am Fixpunkt ergibt sich näherungsweise

$$\delta\vec{x}_{n+1} + \vec{x}_* \approx \Psi(\vec{x}_*) + ([\delta\vec{x}_n]^T \vec{\nabla})\Psi(\vec{x}_*), \quad (7.29)$$

woraus durch Beachtung der Fixpunktgleichung

$$\delta\vec{x}_{n+1} \approx ([\delta\vec{x}_n]^T \vec{\nabla})\Psi(\vec{x}_*) \quad (7.30)$$

folgt. In der Nähe des Fixpunktes multipliziert sich demnach der Fehler durch einen Iterationsschritt gemäß

$$\delta\vec{x}_{n+1} \approx \mathbf{J}_* \delta\vec{x}_n \quad (7.31)$$

mit der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}_* = (J_{*,\alpha,\beta})$ am Fixpunkt, mit Elementen

$$J_{*,\alpha,\beta} = \left. \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial x_\beta} \right|_{\vec{x}=(x_\gamma)=\vec{x}_*}. \quad (7.32)$$

Die Konvergenz oder Divergenz der Picard-Iteration in der Nähe des Fixpunktes wird demnach durch das Spektrum von \mathbf{J}_* bestimmt. Es gilt näherungsweise $\delta\vec{x}_n = O(\lambda_{\max}^n)$, wobei λ_{\max} der betragsgrößte Eigenwert (bzw. der Spektralradius) von \mathbf{J}_* ist. Hat also die Matrix \mathbf{J}_* Eigenwerte mit Betrag größer als Eins, so ist der Fixpunkt instabil und die Iterationsfolge divergiert, da zumindest durch numerische Effekte die Iterationvektoren in der Regel Komponenten in Richtung der entsprechenden Eigenvektoren haben, die durch die Iteration exponentiell anwachsen. Sind alle Eigenwerte betragsmäßig kleiner als Eins, so konvergiert die Iterationsfolge, der Fixpunkt ist stabil. Für $|\lambda_{\max}| = 1$ ist der Fixpunkt

metastabil, und bestimmte Komponenten des Fehlervektors ändern sich durch die Iteration näherungsweise im Betrag nicht.

Für die obige Diskussion ist unerheblich, ob man die Ableitungen der Iterationsfunktion numerisch tatsächlich berechnen kann oder nicht.

Kann man aber an gegebener Stelle \vec{x} Ableitungen von Ψ numerisch berechnen, so wird eine andere Klasse von Iterationsverfahren möglich. Dazu formuliert man die Taylor-Entwicklung (7.31) am Fixpunkt nochmals gemäß

$$\Psi(\vec{x}_n) \approx \vec{x}_* + \mathbf{J}_* (\vec{x}_n - \vec{x}_*) \quad (7.33)$$

um und löst nach dem Fixpunkt auf, wobei angenommen wird, daß die Matrix $\mathbf{1} - \mathbf{J}_*$ invertierbar ist:

$$\vec{x}_* \approx (\mathbf{1} - \mathbf{J}_*)^{-1} (\Psi(\vec{x}_n) - \mathbf{J}_* \vec{x}_n) = \vec{x}_n - (\mathbf{1} - \mathbf{J}_*)^{-1} (\vec{x}_n - \Psi(\vec{x}_n)). \quad (7.34)$$

Würde man also \mathbf{J}_* kennen, so könnte man eine bessere Näherung für den Fixpunkt ausrechnen. Dazu müßte der Fixpunkt aber schon bekannt sein. Als Ausweg kann man die Jacobi-Matrix am Fixpunkt durch die bei \vec{x}_n nähern, also $\mathbf{J}_* \approx \mathbf{J}(\vec{x}_n) = (J_{\alpha,\beta}(\vec{x}_n))$ setzen, wobei die Elemente der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\vec{x})$ allgemein durch

$$J_{\alpha,\beta}(\vec{x}) = \left. \frac{\partial \Psi_\alpha}{\partial x_\beta} \right|_{\vec{x}=(x_\gamma)} \quad (7.35)$$

definiert sind. Man erhält so ein neues Iterationsverfahren der Struktur

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - (\mathbf{1} - \mathbf{J}(\vec{x}_n))^{-1} (\vec{x}_n - \Psi(\vec{x}_n)). \quad (7.36)$$

Dies ist nichts anderes als ein mehrdimensionales Newton-Raphson-Verfahren, das ja im eindimensionalen Falle zur Nullstellenbestimmung einer Funktion $f(x)$ verwendet wird und dort als

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (7.37)$$

definiert ist. Um dies einzusehen, braucht man nur $f(x) = x - \Psi(x)$ zu setzen, woraus $f'(x_n) = 1 - J(x_n)$ mit $J(x) = \Psi'(x)$ folgt.

Das Newton-Raphson-Verfahren kann man auch so interpretieren, daß die ursprüngliche Iterationsfunktion $\Phi = \Psi$ durch eine neue Iterationsfunktion

$$\Phi_{\text{NR}}(\vec{x}) = \vec{x} - (\mathbf{1} - \mathbf{J}(\vec{x}))^{-1} (\vec{x} - \Psi(\vec{x})) \quad (7.38)$$

ersetzt. Diese ist für alle \vec{x} definiert, für die $\mathbf{1} - \mathbf{J}(\vec{x})$ invertierbar ist, und hat die gleichen Fixpunkte wie Ψ . Außerdem verschwindet die Jacobi-Matrix von Φ_{NR} an den Fixpunkten, so daß lokale Konvergenz im allgemeinen gesichert ist. Allerdings ist die Iterationsfunktion beim Newton-Raphson-Verfahren hochgradig nichtlinear, so daß selbst im eindimensionalen Fall chaotische Phänomene wie zum Beispiel seltsame Attraktoren auftreten können [309, S. 140].

Es gibt aber viele Fälle, wo die numerische Berechnung von Ableitungen von Ψ nicht durchführbar oder zu aufwendig ist. In diesem Fall kann man die im folgenden besprochenen Verfahren einsetzen.

Viele Extrapolationsverfahren für Iterationsfolgen kann man so auffassen, daß man statt der Näherung $\mathbf{J}_* \approx \mathbf{J}(\vec{x}_n)$ andere Näherungen $\mathbf{J}_* \approx \tilde{\mathbf{J}}_n$ verwendet, die wie im Falle des Newton-Raphson-Verfahrens zu abgeänderten Iterationsfunktionen

$$\tilde{\Phi}_n(\vec{x}) = \vec{x} - (\mathbf{1} - \tilde{\mathbf{J}}_n)^{-1}(\vec{x} - \Psi(\vec{x})) \quad (7.39)$$

führen. Hierbei hängen die Näherungen $\tilde{\mathbf{J}}_n$ im allgemeinen von anderen Elementen \vec{x}_m , $m \neq n$ ab. Im Falle eines eindimensionalen Sehnen- bzw. Sekantenverfahrens (*regula falsi*) verwendet man beispielsweise die Näherung $J_n = (\Psi(x_n) - \Psi(x_{n-1})) / (x_n - x_{n-1})$.

Allgemeiner gefaßt bedeutet das, daß man durch die Extrapolationsverfahren neue Iterationsfunktionen der Struktur $\Phi_n(\vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n)$ wie in Gl. (7.26) erhält. Will man umgekehrt Extrapolationsverfahren für Iterationsfolgen konstruieren, muß man angeben, wie man aus der Iterationsfunktion $\Phi = \Psi$ der direkten Iteration diese neuen Iterationsfunktionen erhält. Ein wichtiges, relativ allgemeines Verfahren dazu wird im folgenden vorgestellt.

Hierzu nehmen wir an, daß man irgendein Extrapolationsverfahren T für Vektorfolgen $\{\vec{s}_n\}$ kennt, mit dem man aus $k + 1$ gegebenen Folgeelementen einen transformierten Wert gemäß

$$\vec{s}' = T(\vec{s}_0, \vec{s}_1, \dots, \vec{s}_k) \quad (7.40)$$

berechnet, der eine bessere Näherung für den Grenzwert \vec{s} der Folge darstellen soll. Das *Cycling-Verfahren* besteht nun aus den folgenden Schritten: Zunächst führt man die direkte Iteration m -mal durch und berechnet \vec{x}_m , um in die Nähe des Fixpunktes zu kommen ($m = 0$ ist erlaubt). Jetzt führt man im Wechsel k weitere direkte Iterationen und dann Extrapolationen zur Berechnung neuer Startvektoren durch, bis das Verfahren (hoffentlich) konvergiert. Formal kann man dies so beschreiben: Ein k -Zyklus bezüglich der Iterationsfunktion Ψ und des Extrapolationsverfahrens T bei \vec{x} ist definiert als eine Abbildung $Z_k : \vec{x} \rightarrow \vec{x}'$, die durch den Algorithmus

$$\begin{aligned} \vec{u}_0 &= \vec{x} \\ \vec{u}_j &= \Psi(\vec{u}_{j-1}), \quad (j = 1, \dots, k) \\ \vec{x}' &= T(\vec{u}_0, \vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k) \end{aligned} \quad (7.41)$$

beschrieben wird. In einem k -Zykel wird also k -mal die Funktion Ψ sowie einmal der Extrapolationsalgorithmus T verwendet. Das Cycling-Verfahren ist dann für den Startvektor \vec{x}_S durch die Gleichungen

$$\begin{aligned} \vec{x}_0 &= \vec{x}_S \\ \vec{x}_j &= \Psi(\vec{x}_{j-1}), \quad (j = 1, \dots, m) \\ \vec{x}_{m+j} &= Z_k(\vec{x}_{m+j-1}), \quad (j = 1, \dots) \end{aligned} \quad (7.42)$$

definiert. Das bedeutet, daß durch das Cycling-Verfahren nach m Voriterationen die Iterationsfunktion $\Phi = \Psi$ durch die neue Iterationsfunktion Z_k beziehungsweise durch

$$\Phi' = T(\vec{x}_n, \Psi(\vec{x}_n), \Psi \circ \Psi(\vec{x}_n), \dots, \underbrace{\Psi \circ \dots \circ \Psi}_{k\text{-fach}}(\vec{x}_n)) \quad (7.43)$$

ersetzt wird. Hat man N Zyklen abgeschlossen, so wurde $(kN + m)$ -mal die Funktion Ψ und N -mal der Algorithmus T verwendet.

Dieses Verfahren kann insbesondere bei divergenten Iterationen instabil werden. Dann kann man es durch eine Relaxationsmethode stabilisieren. [59, S. 327-330] Dabei ersetzt man die direkten Iterationen in Gl. (7.41) durch die Vorschrift

$$\vec{u}_j = \vec{u}_{j-1} + \alpha_n(\Psi(\vec{u}_{j-1}) - \vec{u}_{j-1}), \quad (j = 1, \dots, k). \quad (7.44)$$

Hierbei sollte die Zahl α_n so gewählt werden, daß für jeden Eigenwert λ_j der Jacobi-Matrix \mathbf{J}_* die Bedingung [49]

$$|1 + \alpha_n(\lambda_j - 1)| < 1 \quad (7.45)$$

erfüllen, falls alle Größen $(\lambda_j - 1)$ Realteile gleichen Vorzeichens haben. Sonst ist die Stabilität am größten, wenn

$$|1 + \alpha_n(\lambda - 1)| < 1 \quad \text{mit} \quad |\lambda - 1| = \max_j |\lambda_j - 1| \quad (7.46)$$

gewählt wird. Da die λ_j im allgemeinen unbekannt sind, kann man das folgende Verfahren benutzen, um α_n ausgehend von $\alpha_0 = 1$ zu berechnen [59, S. 328]:

$$\begin{aligned} \vec{w}_0 &= \vec{x}_n, \\ \vec{w}_1 &= \vec{w}_0 + \alpha_{n-1}(\Psi(\vec{w}_0) - \vec{w}_0), \\ \alpha_n &= -\frac{\|\vec{w}_1 - \vec{w}_0\|}{\|\Psi(\vec{w}_1) - \vec{w}_1 - \Psi(\vec{w}_0) + \vec{w}_0\|}, \end{aligned} \quad (7.47)$$

mit

$$\|\vec{v}\| = \max_{\alpha} |v_{\alpha}|. \quad (7.48)$$

In der Praxis beobachtet man für schlechte Startpunkte bzw. instabile Fixpunkte Divergenz der Iterationsfolgen. Dies trifft auch auf Newton-Raphson-Verfahren zu. Bemerkenswerterweise ist dies in Untersuchungen deterministischer Modelle chaotischer Systeme ein typisches Verhalten. Auch sollte man sich vor Augen halten, daß bei nichtlinearen Iterationsfunktionen ziemlich eigentümliche Phänomene wie fraktale Begrenzungen der Einzugsgebiete verschiedener Fixpunkte oder seltsame Attraktoren auftreten können. Eine weitere Bemerkung ist, daß die Wahl der Iterationsfunktion entscheidet, ob ein Fixpunkt stabil oder instabil ist. Es gibt ja Fälle, in denen direkte Iterationen nicht konvergieren, während beispielsweise entsprechende Newton-Raphson-Verfahren durchaus konvergieren, da die Iterationsfunktion eine andere ist. Wie sind Vektorextrapolationsmethoden hier einzuordnen?

Eine erste Beobachtung ist, daß natürlich auch nichtlineare Extrapolationsverfahren Anlaß zu chaotischen Phänomenen geben sollten, wenn ihr Output iterativ wieder als Input verwendet wird. In vielen Anwendungen ist dies aber nicht die übliche Anwendungsweise von Extrapolationsverfahren und diese komplexe Dynamik ist folglich wenig untersucht worden (vgl. aber [183]) Für Fixpunktiterationen kann ein Cycling-Verfahren als eine geänderte Iterationsfunktion gemäß Gl. (7.43) aufgefaßt werden. Ist diese neue Funktion nichtlinear, was normalerweise der Fall ist, wenn die ursprüngliche Iterationsfunktion oder der Vektorextrapolationsalgorithmus nichtlinear ist, so sind chaotische Phänomene zu erwarten wie für andere nichtlineare Iterationsfunktionen auch. Allerdings erwartet man, daß ein instabiler Fixpunkt von $\Phi = \Psi$ durch geeignet gewählte Extrapolationsverfahren in einen stabilen Fixpunkt von Φ' transformiert wird. Dies ist tatsächlich möglich, wie wir in Kap. 13 sehen werden.

Dies ist verknüpft mit einem zweiten und wichtigeren Aspekt von Extrapolationsverfahren. Sie können divergente in konvergente Folgen verwandeln. Dies ist für skalare Verfahren wohlbekannt. Ein Beispiel ist die durch rationale Approximation vermittelte analytische Fortsetzung von Potenzreihen in Gebiete außerhalb ihres Konvergenzkreises. Ein anderes Beispiel stellt die Summation von hochgradig divergenten Störungsreihen für anharmonische Oszillatoren dar [79, 372, 378].

Die Frage, ob man dergleichen auch für Vektorextrapolationsverfahren beobachten kann, wird durch ein Beispiel in Kap. 13 positiv entschieden. Demnach bieten Vektorextrapolationsprozesse die Chance, durch Folgentransformation Konvergenz auch dort zu erzielen, wo die ursprüngliche Folge divergierte.

7.1.3 Funktionen einer Matrix

Ist \mathbf{A} eine quadratische $d \times d$ Matrix und ist $F(x)$ eine Funktion einer Variablen mit einer Potenzreihenentwicklung

$$F(x) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j x^j, \quad (7.49)$$

mit Partialsummen

$$F_n(x) = \sum_{j=0}^n f_j x^j, \quad (7.50)$$

so kann man die quadratische $d \times d$ Matrix $F(\mathbf{A})$ als Grenzwert

$$F(\mathbf{A}) = \sum_{j=0}^{\infty} f_j \mathbf{A}^j \quad (7.51)$$

definieren, falls dieser Grenzwert existiert. Die praktische Berechnung von $F(\mathbf{A})$ kann dann im Prinzip über die Partialsummen

$$F_n(\mathbf{A}) = \sum_{j=0}^n f_j \mathbf{A}^j \quad (7.52)$$

erfolgen. Diese können allerdings langsam konvergieren. Es stellt sich demnach die Frage nach der Konvergenzbeschleunigung dieses Verfahrens.

Wir bemerken, daß andere Definitionen sowie Verfahren zur Berechnung solcher Matrixfunktionen natürlich ebenfalls möglich sind, zum Beispiel für normale Matrizen über die Bestimmung der Eigenwerte und -vektoren, oder über die Formel

$$F(\mathbf{A}) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\Gamma} F(z)(z\mathbf{1} - \mathbf{A})^{-1} dz, \quad (7.53)$$

wobei die Kontur Γ das Spektrum $\sigma(\mathbf{A})$ der Matrix in der komplexen Ebene einmal umläuft. [133, Kap. 11, S. 539-560],[295]

Ist nun

$$R_{p,q}(x) = \frac{P_p(x)}{Q_q(x)} \quad (7.54)$$

eine rationale Approximation von $F(x)$ als Quotient zweier Polynome $P_p(x)$ vom Grade p und $Q_q(x)$ vom Grade q , so kann man Approximationen

$$R_{p,q}(\mathbf{A}) = \frac{P_p(\mathbf{A})}{Q_q(\mathbf{A})} \quad (7.55)$$

definieren.

Beispielsweise kann man hier Padé-Approximationen $[p/q]_F(x)$ verwenden (siehe Gl. (2.34)). Eine andere Möglichkeit stellt die Verwendung von Levin-artigen Transformationen mit $\omega_n \propto \Delta F_n(x)$ dar, die im allgemeinen bei Anwendung auf Potenzreihen auch rationale Approximationen liefern. Zum Beispiel stellt die t -Variante $t_k^{(n)}(\beta, F_n(z))$ der Levin-Transformation eine rationale Approximation mit $p = k + n$ und $q = k$ dar.

Alle diese rationalen Approximationen für $F(\mathbf{A})$ sind eindeutig definiert, da alle Funktionen einer festen Matrix \mathbf{A} miteinander vertauschen.

Neben der Berechnung der beiden Matrixpolynome, des Zählerpolynomes $P_p(\mathbf{A})$ und des Nennerpolynomes $Q_q(\mathbf{A})$, erfordert die Berechnung von $R_{p,q}(\mathbf{A})$ auch noch die Inversion des Nennerpolynomes. Diese Inversion erfordert verhältnismäßig viele numerische Operationen.

Ist man nur an der Anwendung von $f(\mathbf{A})$ auf einen Vektor \vec{v} interessiert, so kann man die Näherungen

$$\vec{v}_{p,q} = R_{p,q}(\mathbf{A})\vec{v} \quad (7.56)$$

betrachten, die man dann besser durch Lösung des linearen Gleichungssystems

$$Q_p(\mathbf{A})\vec{v}_{p,q} = P_p(\mathbf{A})\vec{v} \quad (7.57)$$

bestimmt.

Hat \mathbf{A} Bandstruktur, so kann man durch Verwendung von Faktorisierungen des Nennerpolynomes (oder beider Polynome) Operationen einsparen. Der Grund ist, daß für $Q_q(\mathbf{A}) = (x_1 \mathbf{1} - \mathbf{A}) \cdots (x_q \mathbf{1} - \mathbf{A})$ die einzelnen Faktoren $(x_j \mathbf{1} - \mathbf{A})$ ebenfalls Bandstruktur

haben und damit relativ wenig Operationen für Inversion oder Lösung von Gleichungssystemen erfordern, während $Q_q(\mathbf{A})$ keine einfache Bandstruktur mehr hat, was mehr Operationen nötig macht. Vergleiche auch [227].

Einen anderen Zugang bieten Matrizen- und Vektorextrapolationsverfahren, bei denen auf die Inversion von Matrizen zugunsten der Verwendung von Pseudoinversen ganz verzichtet werden kann. Dies wird später untersucht.

Wir bemerken, daß die oben beschriebene Problematik wesentlich von der der Berechnung von matrixwertigen Potenzreihen, also Reihen der Struktur

$$\mathbf{F}(z) = \sum_{j=0}^{\infty} z^j \mathbf{f}_j \quad (7.58)$$

mit Matrixkoeffizienten \mathbf{f}_j , verschieden ist. Auch hier kann man rationale Approximationen einführen, muß dann allerdings auf die Reihenfolge der Faktoren aufpassen. Sind

$$\mathbf{P}_p(z) = \sum_{j=0}^p \mathbf{p}_j z^j \quad (7.59)$$

$$\mathbf{Q}_q(z) = \sum_{j=0}^q \mathbf{q}_j z^j \quad (7.60)$$

zwei Polynome mit Matrixkoeffizienten, so sind die beiden rationalen Matrixausdrücke

$$\mathbf{R}_{p,q}(z) = [\mathbf{Q}_q(z)]^{-1} \mathbf{P}_p(z) \quad (7.61)$$

und

$$\mathbf{R}'_{p,q}(z) = \mathbf{P}_p(z) [\mathbf{Q}_q(z)]^{-1} \quad (7.62)$$

im allgemeinen verschieden. Eine Bedingung

$$\mathbf{F}(z) - \mathbf{R}_{p,q} = O(z^{p+q+1}), \quad (7.63)$$

wie man sie im Falle der Matrix-Padé-Approximation verwendet, liefert also andere Zähler- und Nennerpolynome als die entsprechende Bedingung mit $\mathbf{R}'_{p,q}$. [15]

7.2 Algorithmen

In diesem Abschnitt werden einige wichtige bekannte Verfahren für die Extrapolation von Vektorfolgen dargestellt, sofern sie für das Folgende von Interesse sind. Wie oben bemerkt, kann man diese Algorithmen selbstverständlich auch für Matrizenfolgen verwenden.

7.2.1 Die DIIS-Methode

Pulay hat für die Beschleunigung von vektorwertigen Iterationsfolgen eine Methode eingeführt, die als *Direct Inversion in the Iterative Subspace* (DIIS) bezeichnet wird [287]. Diese Methode basiert auf einem Ansatz

$$\vec{s} = \sum_{j=1}^m c_j \vec{s}_{n+j-1} \quad (7.64)$$

für den Grenzwert \vec{s} als Linearkombination von m Folgeelementen \vec{s}_j . Die Koeffizienten c_j werden dabei nach der Methode der kleinsten Quadrate bestimmt. Dazu werden die Folgeelemente als Zufallsgrößen aufgefaßt. Man fordert, daß der Differenzvektor

$$\Delta \vec{s} = \sum_{j=1}^m c_j \Delta \vec{s}_{n+j-1} \quad (7.65)$$

den Wert Null approximiert. Zu lösen ist also das Minimierungsproblem

$$\left\| \sum_{j=1}^m c_j \Delta \vec{s}_{n+j-1} \right\|^2 = \min \quad (7.66)$$

mit $\|\vec{a}\|^2 = \vec{a}^\dagger \vec{a}$. Außerdem stellt man die Nebenbedingung $\sum c_j = 1$. Das führt auf die Matrixgleichung

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \dots & B_{1m} & -1 \\ B_{21} & B_{22} & \dots & B_{2m} & -1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ B_{m1} & B_{m2} & \dots & B_{mm} & -1 \\ -1 & -1 & \dots & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \quad (7.67)$$

mit

$$B_{ij} = [\Delta \vec{s}_{n+i-1}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+j-1} \quad (7.68)$$

und dem Lagrange-Multiplikator λ für die Nebenbedingung. Lösung dieses linearen Gleichungssystems ergibt die Koeffizienten c_j , die man in Gl. (7.64) einsetzt, um einen besseren Schätzwert für den Grenzwert \vec{s} zu erhalten. Eine Variante der DIIS-Methode mit der Nebenbedingung $\sum c_j^2 = 1$ wurde von Sellers untersucht [313]. Die DIIS-Methode kann man zur Beschleunigung von Iterationsfolgen bei der Lösung der Hartree-Fock-Gleichungen, bei der Bestimmung von selbstkonsistenten Multikonfigurationswellenfunktionen oder auch bei Geometrieoptimierungen einsetzen [84, 150]. Erfahrung dabei zeigt, daß man m dabei nicht zu groß wählen sollte. Erfolgreiche Extrapolation findet man häufig für $3 \leq m \leq 8$.

7.2.2 Epsilon-Algorithmen

Unter Verwendung der Pseudoinversen aus Abschnitt 7.1.1 hat Wynn [401] den skalaren ϵ -Algorithmus direkt zum *vektoriellen ϵ -Algorithmus* verallgemeinert. Dieser wird auch als *Vektor- ϵ -Algorithmus* bezeichnet und hat die Form

$$\begin{aligned}\vec{\epsilon}_{-1}^{(n)} &= 0, & \vec{\epsilon}_0^{(n)} &= \vec{s}_n \\ \vec{\epsilon}_{k+1}^{(n)} &= \vec{\epsilon}_{k-1}^{(n+1)} + \left[\vec{\epsilon}_k^{(n+1)} - \vec{\epsilon}_k^{(n)} \right]^{-}\end{aligned}\quad (7.69)$$

Theoretische Eigenschaften des Vektor- ϵ -Algorithmus und seine Beziehung zur Vektor-Padé-Approximation und einem modifizierten Aitken-Verfahren der Form

$$\vec{t}_n = \vec{s}_{n+1} - \Delta \vec{s}_{n+1} \frac{(\Delta \vec{s}_n)^2}{\Delta \vec{s}_n^T \Delta^2 \vec{s}_n} \quad (7.70)$$

für Vektorfolgen \vec{s}_n wurden in jüngerer Zeit von Graves-Morris und Mitarbeitern untersucht [82, 139].

Um weitergehende Aussagen theoretischer Art machen zu können, vor allem, um Determinantendarstellungen zur Verfügung zu haben, hat Brezinski einen verwandten Algorithmus vorgeschlagen [48]. Betrachtet werden — in Analogie zur Darstellung (2.23) der Shanks-Transformation — Determinanten der Struktur

$${}_j \vec{e}_k(\vec{s}_n) = \frac{\begin{vmatrix} \vec{s}_{n+j} & \dots & \vec{s}_{n+k+j} \\ \vec{y}^T \Delta \vec{s}_n & \dots & \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+k} \\ \vdots & & \vdots \\ \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+k-1} & \dots & \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vec{y}^T \Delta \vec{s}_n & \dots & \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+k} \\ \vdots & & \vdots \\ \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+k-1} & \dots & \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+2k-1} \end{vmatrix}}. \quad (7.71)$$

Die Zählerdeterminante ist dabei als derjenige Vektor definiert, der sich als Linearkombination der Vektoren in der ersten Zeile ergibt, wenn man die Determinante formal nach den üblichen Regeln für Determinanten nach der ersten Zeile entwickelt. Der Vektor $\vec{y} \neq 0$ ist hierbei beliebig, aber fest gewählt.

Die vektorwertigen Determinanten $\vec{e}_k(\vec{s}_n) = {}_0 \vec{e}_k(\vec{s}_n)$ kann man rekursiv berechnen. Dazu dient der *topologische ϵ -Algorithmus* [48], der durch [59, S. 222]

$$\begin{aligned}\vec{\epsilon}_{-1}^{(n)} &= 0, & \vec{\epsilon}_0^{(n)} &= \vec{s}_n \\ \vec{\epsilon}_{2k+1}^{(n)} &= \vec{\epsilon}_{2k-1}^{(n+1)} + \frac{\vec{y}}{\vec{y}^T (\vec{\epsilon}_{2k}^{(n+1)} - \vec{\epsilon}_{2k}^{(n)})}\end{aligned}\quad (7.72)$$

$$\vec{\epsilon}_{2k+2}^{(n)} = \vec{\epsilon}_{2k}^{(n+1)} + \frac{\vec{\epsilon}_{2k}^{(n+1)} - \vec{\epsilon}_{2k}^{(n)}}{(\vec{\epsilon}_{2k+1}^{(n+1)} - \vec{\epsilon}_{2k+1}^{(n)})^T (\vec{\epsilon}_{2k}^{(n+1)} - \vec{\epsilon}_{2k}^{(n)})}.$$

definiert ist. Es gilt

$$\vec{e}_{2k}^{(n)} = \vec{e}_k(\vec{s}_n), \quad \vec{e}_{2k+1}^{(n)} = \frac{\vec{y}}{\vec{y}^T \vec{e}_k(\Delta \vec{s}_n)}. \quad (7.73)$$

Man beachte, daß wie im Falle des Vektor- ϵ -Algorithmus Pseudoinverse auftreten. Im Falle des topologischen ϵ -Algorithmus erkennt man allerdings die Pseudoinversen bezüglich eines symmetrischen Produktes und eines weiteren Vektors gemäß Gl. (7.12), nämlich $[\Delta_n \vec{e}_{2k}^{(n)}] \sim (\vec{y})$ und $[\Delta_n \vec{e}_{2k+1}^{(n)}] \sim (\Delta_n \vec{e}_{2k}^{(n)})$.

Die Verwendung von anderen Formen von Pseudoinversen, insbesondere bezüglich einer Norm oder bezüglich eines Skalarproduktes bei komplexen Vektoren, ist sowohl beim vektoriellen als auch beim topologischen ϵ -Algorithmus möglich und führt zu Algorithmen mit neuen Eigenschaften [59, S. 219f, 223].

Die Größen ${}_k \vec{e}_k(\vec{s}_n)$ kann man mit einem eng verwandten Algorithmus berechnen, der auch als *zweiter topologischer ϵ -Algorithmus* bezeichnet wird [59, S. 223].

Für beide Algorithmen, den topologischen und den vektoriellen ϵ -Algorithmus, sind die Größen $\vec{e}_{2k+1}^{(n)}$ nur Hilfsgrößen.

Bedingungen für den Kern dieser Algorithmen, die von McLeod [246], Graves-Morris [137] und Brezinski [48] stammen, sind im folgenden Satz angegeben.

Satz 7.1

[59, Theoreme 4.2, 4.3] Wenn für alle $n \geq N$ die Gleichung $a_0(\vec{s}_n - \vec{s}) + \dots + a_k(\vec{s}_{n+k} - \vec{s}) = 0$ gilt, wobei \vec{s} ein Vektor ist und die a_j (reelle oder komplexe) Zahlen mit $a_k \neq 0$ und $a_0 + \dots + a_k \neq 0$ sind, dann gelten für alle $n \geq N$ die Gleichungen $\vec{e}_{2k}^{(n)} = \vec{s}$, ${}_0 \vec{e}_k = \vec{s}$ und ${}_0 \vec{e}_k = \vec{s}$.

Man beachte, daß dieser Satz keine notwendige Bedingungen an den jeweiligen Kern formuliert, sondern nur hinreichende.

Der vektorielle und der topologische ϵ -Algorithmus sowie der komponentenweise verwandte skalare ϵ -Algorithmus sind *exakt* für Folgen der Gestalt (7.25) und können als damit als direkte Methoden zur Lösung von linearen Gleichungssystemen eingestuft werden. Genauer formuliert dies der folgende Satz.

Satz 7.2

[59, Theorem 6.17] Man wende den (skalaren, vektoriellen oder topologischen) ϵ -Algorithmus auf die Folge

$$\vec{x}_{n+1} = \mathbf{A} \vec{x}_n + \vec{b}, \quad n = 0, 1, \dots \quad (7.74)$$

mit beliebigem Startvektor \vec{x}_0 an. Ist $\mathbf{1} - \mathbf{A}$ invertierbar, so sei $\vec{x} = (\mathbf{1} - \mathbf{A})^{-1} \vec{b}$. Ferner sei m der Grad des Minimalpolynoms P von \mathbf{A} für den Vektor $\vec{x}_0 - \vec{x}$, wobei das Minimalpolynom von \mathbf{A} für den Vektor \vec{y} als das Polynom Q kleinsten Grades definiert ist, für das $Q(\mathbf{A})\vec{y} = 0$ gilt. Außerdem sei r die Multiplizität einer etwaigen Nullstelle von P für verschwindendes Argument (also $r = 0$ falls $P(0) \neq 0$). Dann gilt für alle $n \geq 0$

$$\vec{e}_{2(m-r)}^{(n+r)} = \vec{x}. \quad (7.75)$$

Wir bemerken, daß beide Algorithmen schon erfolgreich für die Konvergenzbeschleunigung des Verfahrens der konjugierten Gradienten eingesetzt wurden [1, 288].

7.2.3 Der Vektor- E -Algorithmus

Verwendet man eine Modellfolge

$$\vec{\sigma}_n = \vec{\sigma} + \sum_{j=1}^k a_j \vec{g}_j(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, k \in \mathbb{N}, \quad (7.76)$$

so ist dafür der Vektor- E -Algorithmus mit das Rekursionsschema [59, Abschn. 4.3]

$$\vec{E}_0^{(n)} = \vec{s}_n, \quad \vec{g}_{0,i}^{(n)} = \vec{g}_i(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, i \in \mathbb{N} \quad (7.77a)$$

$$\vec{E}_k^{(n)} = \vec{E}_{k-1}^{(n)} - \frac{\vec{y}^T (\vec{E}_{k-1}^{(n+1)} - \vec{E}_{k-1}^{(n)})}{\vec{y}^T (\vec{g}_{k-1,k}^{(n+1)} - \vec{g}_{k-1,k}^{(n)})} \cdot \vec{g}_{k-1,k}^{(n)} \quad (7.77b)$$

$$\vec{g}_{k,i}^{(n)} = \vec{g}_{k-1,i}^{(n)} - \frac{\vec{y}^T (\vec{g}_{k-1,i}^{(n+1)} - \vec{g}_{k-1,i}^{(n)})}{\vec{y}^T (\vec{g}_{k-1,k}^{(n+1)} - \vec{g}_{k-1,k}^{(n)})} \cdot \vec{g}_{k-1,k}^{(n)}, \quad i = k+1, k+2, \dots \quad (7.77c)$$

exakt, wobei $\vec{y} \neq 0$ ein beliebiger, aber fest gewählter Vektor ist, wobei natürlich kein Nenner in Gl. (7.77) verschwinden darf. Aufgrund der Vektornatur der $\vec{g}_{k,i}^{(n)}$ ist dies allerdings ein ziemlich aufwendiger Algorithmus, der für größere Vektorlängen großen Speicher verlangt.

7.2.4 H -Algorithmus

Für Modellfolgen

$$\vec{\sigma}_n = \vec{\sigma} + \sum_{j=1}^k \vec{a}_j g_j(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, k \in \mathbb{N}, \quad (7.78)$$

ist der H -Algorithmus [59, Abschn. 4.5]

$$\vec{H}_k^{(n)} = \begin{array}{c} \left| \begin{array}{ccc} \vec{s}_n & \cdots & \vec{s}_{n+k} \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{array} \right| \\ \hline \left| \begin{array}{ccc} 1 & \cdots & 1 \\ g_1(n) & \cdots & g_1(n+k) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ g_k(n) & \cdots & g_k(n+k) \end{array} \right| \end{array} \quad (7.79)$$

mit dem Rekursionsschema

$$\vec{H}_0^{(n)} = \vec{s}_n, \quad g_{0,i}^{(n)} = g_i(n), \quad n \in \mathbb{N}_0, i \in \mathbb{N} \quad (7.80a)$$

$$\vec{H}_k^{(n)} = \vec{H}_{k-1}^{(n)} - \frac{\vec{H}_{k-1}^{(n+1)} - \vec{H}_{k-1}^{(n)}}{g_{k-1,k}^{(n+1)} - g_{k-1,k}^{(n)}} \cdot g_{k-1,k}^{(n)} \quad (7.80b)$$

$$g_{k,i}^{(n)} = g_{k-1,i}^{(n)} - \frac{g_{k-1,i}^{(n+1)} - g_{k-1,i}^{(n)}}{g_{k-1,k}^{(n+1)} - g_{k-1,k}^{(n)}} \cdot g_{k-1,k}^{(n)}, \quad i = k+1, k+2, \dots \quad (7.80c)$$

exakt. Dies entspricht einer komponentenweisen Anwendung des skalaren E -Algorithmus mit $g_j(n)$, die für alle Komponenten gleich sind.

Der H -Algorithmus erlaubt die Berechnung einer großen Klasse von Vektorextrapolationsverfahren. Wir geben einige wichtige Fälle an, wobei wir uns der Einfachheit halber auf reelle Vektoren beschränken:

- Das Henrici-Verfahren [155, S. 115], für dessen Berechnung der H -Algorithmus von Brezinski ursprünglich eingeführt wurde (laut Ref. [59, S.238]), erhält man für $k = d$ und $g_i(n) = \vec{e}_i^T \Delta \vec{s}_n$, wobei $\vec{e}_i = (\delta_{i,\alpha})$ der i -te Einheitsvektor ist.
- Für $g_i(n) = \vec{y}^T \Delta \vec{s}_{n+i-1}$ erhält man die Ergebnisvektoren des topologischen ϵ -Algorithmus gemäß $\vec{e}_{2k}^n = \vec{e}_k(\vec{s}_n) = \vec{H}_k^{(n)}$.
- Für $g_i(n) = \Delta \vec{s}_{n+i-1}^T \Delta \vec{s}_n$ erhält man das MPE-Verfahren (*minimal polynomial extrapolation*) von Cabay und Jackson [68].
- Für $g_i(n) = \Delta^2 \vec{s}_{n+i-1}^T \Delta \vec{s}_n$ erhält man das RRE-Verfahren (*reduced rank extrapolation*) von Eddy [109] und Mešina [249].
- Für $g_i(n) = \vec{y}_i^T \Delta \vec{s}_n$ erhält man das MMPE-Verfahren (*modified minimal polynomial extrapolation*) von Sidi, Ford und Smith [326].

7.2.5 Projektionsmethoden

Der topologische ϵ -Algorithmus und der H -Algorithmus können als Projektionsmethoden angesehen werden. Außerdem gehören dazu polynomiale Methoden, wie die im letzten Abschnitt angesprochenen MPE-, RRE- und MMPE-Verfahren. Es handelt sich bei allen diesen Verfahren um Krylov-Verfahren, wenn man sie auf Iterationen vom Typ (7.25) anwendet, und sie sind somit dem Verfahren der konjugierten Gradienten und seinen Verallgemeinerungen äquivalent [319]. Rekursive Algorithmen für diese Verfahren sind bekannt [63, 124, 321].

Die folgende Beschreibung dieser Verfahren stützt sich auf eine Arbeit von Jbilou und Sadok [185].

Alle diese Verfahren extrapolieren Folgen von Vektoren $\vec{s}_n \in \mathbb{C}^d$ und haben die Struktur

$$\vec{T}_{n,k} = \begin{array}{c} \left| \begin{array}{ccc} \vec{s}_n & \dots & \vec{s}_{n+k} \\ [\vec{y}_1^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_n & \dots & [\vec{y}_1^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+k} \\ \vdots & & \vdots \\ [\vec{y}_k^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+k-1} & \dots & [\vec{y}_k^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+2k-1} \end{array} \right| \\ \hline \left| \begin{array}{ccc} 1 & \dots & 1 \\ [\vec{y}_1^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_n & \dots & [\vec{y}_1^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+k} \\ \vdots & & \vdots \\ [\vec{y}_k^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+k-1} & \dots & [\vec{y}_k^{(n)}]^\dagger \Delta \vec{s}_{n+2k-1} \end{array} \right| \end{array} \quad (7.81)$$

mit $k \leq d$. Hierbei sind die $\vec{y}_j^{(n)}$ gegebene Vektoren aus \mathbb{C}^d . Ist $\Delta_{n,k}^{(i)}$ die $d \times k$ Matrix mit Spalten $\Delta^i \vec{s}_n, \dots, \Delta^i \vec{s}_{n+k-1}$ für $i = 1, 2$ und ist $\mathbf{Y}_{n,k}$ die $d \times k$ Matrix mit Spalten $\vec{y}_1^{(n)}, \dots, \vec{y}_k^{(n)}$, so gilt

$$\vec{T}_{n,k} = \vec{s}_n - \Delta_{n,k}^{(1)} \left(\mathbf{Y}_{n,k} \dagger \Delta_{n,k}^{(2)} \right)^{-1} \mathbf{Y}_{n,k} \dagger \Delta \vec{s}_n. \quad (7.82)$$

Dabei wird angenommen, daß die Matrix $\mathbf{Y}_{n,k} \dagger \Delta_{n,k}^{(2)}$ invertierbar ist. Wir bemerken, daß alle diese Verfahren rekursiv mit dem H -Algorithmus mit $g_i(n) = \vec{y}_i^{(n) \dagger} \Delta \vec{s}_{n+i-1}$ berechenbar sind.

All diese Projektionsmethoden sind direkte Methoden für die Lösung des linearen Gleichungssystems $\vec{x} = \mathbf{A} \vec{x} + \vec{b}$, wenn man die Iteration (7.25) zugrundelegt.

Wenn man diese Methoden zur iterativen Lösung von nichtlinearen Fixpunktgleichungen $\vec{x}_* = \Psi(\vec{x}_*)$ verwenden, so kann man die folgende Variante des Cycling-Verfahrens mit Startvektor \vec{x}_S benutzen:

$$\begin{aligned} \vec{x}_0 &= \vec{x}_S \\ \vec{x}_{n+1} &= Z_{k(n)}(\vec{x}_n), \quad (n = 0, \dots). \end{aligned} \quad (7.83)$$

Hierbei ist $Z_{k(n)}$ ein $k(n)$ -Zykel bezüglich Ψ und $T_{0,k(n)}$ bei \vec{x}_n (vgl. Gl. (7.41)). Außerdem ist $k(n)$ als Grad des Minimalpolynoms der Jacobi-Matrix \mathbf{J}_* am Fixpunkt \vec{x}_* für den Vektor $\vec{x}_n - \vec{x}$ gewählt. Wir erinnern an die Definition (7.35) der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\vec{x})$ von $\Psi(\vec{x})$. Hierbei ist $T_{n,k}$ das MPE- oder das RRE-Verfahren.

Dann gilt der folgende Satz, der unter bestimmten Bedingungen ableitungsfreie, quadratische Konvergenz des Verfahrens garantiert.

Satz 7.3

[59, Theorem 6.26] Wenn $\mathbf{1} - \mathbf{J}_*$ invertierbar ist, wenn $\|\mathbf{J}(\vec{u}) - \mathbf{J}(\vec{v})\| \leq L \|\vec{u} - \vec{v}\|$ für alle $\vec{u}, \vec{v} \in D \subseteq \mathbb{R}^d$ gilt und wenn es ein $\alpha > 0$ gibt, so daß für alle $\vec{u} \in D_0 - \{x\}$ die Ungleichung $\alpha(u) > \alpha$ gilt, wobei $D_0 \subseteq D$ gilt und $\alpha(u) = \sqrt{\det(\mathbf{H}_n^\dagger(\vec{u}) \mathbf{H}_n(\vec{u}))}$ über die

Matrix $\mathbf{H}_n(\vec{u})$ ausgedrückt werden kann, deren Spalten durch

$$\frac{\Psi^{(i)}(\vec{u}) - \Psi^{(i-1)}(\vec{u})}{\|\Psi^{(i)}(\vec{u}) - \Psi^{(i-1)}(\vec{u})\|} \text{ für } i = 1, \dots, k(n) \quad (7.84)$$

gegeben sind, mit $\Psi^{(0)}(\vec{u}) = \vec{u}$, $\Psi^{(i)}(\vec{u}) = \Psi(\Psi^{(i-1)}(\vec{u}))$ und dem Grad $k(n)$ des Minimalpolynoms von $\mathbf{J}(\vec{u})$ für den Vektor $\vec{x}_n - \vec{x}_*$, so gibt es $U \subseteq D_0$, so daß für alle $\vec{x}_S \in U$ die Folge $\{\vec{x}_n\}$ aus Gl. (7.83) quadratisch gegen \vec{x}_* konvergiert, also

$$\|x_{n+1} - \vec{x}_*\| = O\left(\|\vec{x}_n - \vec{x}_*\|^2\right) \quad (7.85)$$

gilt.

Ein entsprechendes Ergebnis besagt, daß man auch durch ein Cycling-Verfahren mit dem topologischen ϵ -Algorithmus quadratische Konvergenz erhält, ohne Ableitungen berechnen zu müssen. [221]

Kapitel 8

Die verallgemeinerte \mathcal{J} -Transformation

In Verallgemeinerung der skalaren \mathcal{J} -Transformation führen wir eine Reihe von nichtskalaren Folgentransformationen ein.

8.1 Varianten für Matrizenfolgen

Wir betrachten zunächst Verallgemeinerungen der skalaren \mathcal{J} -Transformation für die Extrapolation von Matrizenfolgen.

Zu beachten ist, daß man stets statt der Matrizenfolge \mathbf{s}_n auch die Folgen \mathbf{s}_n^T oder \mathbf{s}_n^\dagger extrapolieren kann, was im Falle von rechteckigen Matrizen zu weiteren Varianten jeder Folgentransformation $T(\mathbf{s}_n)$ gemäß $T'(\mathbf{s}_n) = [T(\mathbf{s}_n^T)]^T$ bzw. $T''(\mathbf{s}_n) = [T(\mathbf{s}_n^\dagger)]^\dagger$ führt, die von T verschieden sein können.

8.1.1 Matrix-I- \mathcal{J} -Transformation

Eine Variante mit Matrixinversion für quadratische $N \times N$ Matrizen \mathbf{s}_n , $\boldsymbol{\omega}_n$ und $\mathbf{r}_n^{(k)}$ ist der Algorithmus

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_n^{(0)} &= \mathbf{s}_n, & \boldsymbol{\omega}_n^{(0)} &= \boldsymbol{\omega}_n, \\ \mathbf{s}_n^{(k+1)} &= \mathbf{s}_{n+1}^{(k)} - \Delta \mathbf{s}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{-1} \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \boldsymbol{\omega}_n^{(k+1)} &= -\Delta \mathbf{r}_n^{(k)} \boldsymbol{\omega}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{-1} \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \mathbf{s}_n^{(k)} \end{aligned} \tag{8.1}$$

Wir nennen dies die *Matrix-I- \mathcal{J} -Transformation*. Diese Variante iteriert die grundlegende Transformation

$$\mathbf{s}_n^{(1)} = \mathbf{s}_{n+1} - \Delta \mathbf{s}_n [\Delta \boldsymbol{\omega}_n]^{-1} \boldsymbol{\omega}_{n+1}, \tag{8.2}$$

die für Modellfolgen

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + \mathbf{c} \boldsymbol{\omega}_n \tag{8.3}$$

mit einer $N \times N$ Matrix \mathbf{c} exakt ist, in hierarchisch konsistenter Weise, indem als nächste Stufe der Hierarchie Modellfolgen der Form

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + (\mathbf{c}_0 + \mathbf{c}_1 \mathbf{r}_n) \boldsymbol{\omega}_n \quad (8.4)$$

betrachtet werden. Setzt man $\mathbf{N}_n^{(k)} = \mathbf{s}_n^{(k)} [\boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{-1}$, $\mathbf{D}_n^{(k)} = [\boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{-1}$ und $\boldsymbol{\delta}_n^{(k)} = \Delta \mathbf{r}_n^{(k)}$, so kann man die Matrix- \mathcal{J} -Transformation auch mit dem Algorithmus

$$\begin{aligned} \mathbf{N}_n^{(0)} &= \mathbf{s}_n [\boldsymbol{\omega}_n]^{-1}, & \mathbf{D}_n^{(0)} &= [\boldsymbol{\omega}_n]^{-1}, \\ \mathbf{N}_n^{(k+1)} &= \Delta \mathbf{N}_n^{(k)} [\boldsymbol{\delta}_n^{(k)}]^{-1} \\ \mathbf{D}_n^{(k+1)} &= \Delta \mathbf{D}_n^{(k)} [\boldsymbol{\delta}_n^{(k)}]^{-1} \\ {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \mathbf{N}_n^{(k)} [\mathbf{D}_n^{(k)}]^{-1} \end{aligned} \quad (8.5)$$

berechnen.

Es gilt für beliebige $N \times N$ Matrizen \mathbf{a} und \mathbf{b}

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{a} \mathbf{s}_n + \mathbf{b}\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = \mathbf{a} {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) + \mathbf{b}. \quad (8.6)$$

Ist \mathbf{a} zusätzlich invertierbar, so gilt ferner

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n \mathbf{a} + \mathbf{b}\}, \{\mathbf{a}^{-1} \boldsymbol{\omega}_n \mathbf{a}\}, \{\mathbf{a}^{-1} \mathbf{r}_n^{(k)} \mathbf{a}\}) = {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) \mathbf{a} + \mathbf{b} \quad (8.7)$$

sowie

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\mathbf{a} \boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{a} \mathbf{r}_n^{(k)} \mathbf{a}^{-1}\}) = {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}), \quad (8.8)$$

was

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{a}^{-1} \mathbf{s}_n \mathbf{a}\}, \{\boldsymbol{\omega}_n \mathbf{a}\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = \mathbf{a}^{-1} {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) \mathbf{a} \quad (8.9)$$

und

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{a}^{-1} \mathbf{s}_n \mathbf{a}\}, \{\mathbf{a}^{-1} \boldsymbol{\omega}_n \mathbf{a}\}, \{\mathbf{a}^{-1} \mathbf{r}_n^{(k)} \mathbf{a}\}) = \mathbf{a}^{-1} {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) \mathbf{a} \quad (8.10)$$

impliziert.

Für beliebige Konstanten $a \neq 0$ gilt

$${}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{a \boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = {}_I \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}). \quad (8.11)$$

Als Restabschätzung kann man hier zum Beispiel $\boldsymbol{\omega}_n = \Delta \mathbf{s}_n$ verwenden. Es sind aber auch kompliziertere Restabschätzungen wie $\boldsymbol{\omega}_n = (n + \beta) \Delta \mathbf{s}_n$ oder auch $\boldsymbol{\omega}_n = \mathbf{y}_n \Delta \mathbf{s}_n$ mit gegebenen $N \times N$ Matrizen \mathbf{y}_n verwendbar.

8.1.2 Matrix-R- \mathcal{J} -Transformation

Eine Variante mit Rechtsinversen aus Gl. (7.19) für $M \times N$ Matrizen \mathbf{s}_n , $K \times N$ Matrizen $\boldsymbol{\omega}_n$ und $K \times K$ Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ mit $K \leq N$ ist definiert durch

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_n^{(0)} &= \mathbf{s}_n, & \boldsymbol{\omega}_n^{(0)} &= \boldsymbol{\omega}_n, \\ \mathbf{s}_n^{(k+1)} &= \mathbf{s}_{n+1}^{(k)} - \Delta \mathbf{s}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^R \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \boldsymbol{\omega}_n^{(k+1)} &= -\Delta \mathbf{r}_n^{(k)} \boldsymbol{\omega}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^R \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)} \\ {}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \mathbf{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.12)$$

Wir nennen dies die *Matrix-R- \mathcal{J} -Transformation*. Diese Variante iteriert die grundlegende Transformation

$$\mathbf{s}_n^{(1)} = \mathbf{s}_{n+1} - \Delta \mathbf{s}_n [\Delta \boldsymbol{\omega}_n]^R \boldsymbol{\omega}_{n+1}, \quad (8.13)$$

die für Modellfolgen

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + \mathbf{c} \boldsymbol{\omega}_n \quad (8.14)$$

mit einer $M \times K$ Matrix \mathbf{c} exakt ist, in hierarchisch konsistenter Weise, indem als nächste Stufe der Hierarchie Modellfolgen der Form

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + (\mathbf{c}_0 + \mathbf{c}_1 \mathbf{r}_n) \boldsymbol{\omega}_n \quad (8.15)$$

betrachtet werden.

Eine entsprechende Verallgemeinerung der \mathcal{J} -Transformation unter Verwendung von Linksinversen kann man ebenso angeben, worauf hier allerdings verzichtet werden soll.

Es gilt für jede $N \times N$ Matrix \mathbf{a} und jede $M \times N$ Matrix \mathbf{b}

$${}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{a} \mathbf{s}_n + \mathbf{b}\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = \mathbf{a} {}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) + \mathbf{b}. \quad (8.16)$$

Ist \mathbf{A} eine unitäre $N \times N$ Matrix und ist \mathbf{B} eine invertierbare $K \times K$ Matrix, so gilt ferner

$${}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n \mathbf{A}\}, \{\mathbf{B} \boldsymbol{\omega}_n \mathbf{A}\}, \{\mathbf{B} \mathbf{r}_n^{(k)} \mathbf{B}^{-1}\}) = {}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) \mathbf{A}. \quad (8.17)$$

Für beliebige Konstanten $a \neq 0$ gilt

$${}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{a \boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = {}_R \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}). \quad (8.18)$$

Als Restabschätzung kann man hier nur für $M = K$ den Ausdruck $\boldsymbol{\omega}_n = \Delta \mathbf{s}_n$ verwenden. Das gilt auch für $\boldsymbol{\omega}_n = (n + \beta) \Delta \mathbf{s}_n$. Für $M \neq K$ kann man stattdessen $\boldsymbol{\omega}_n = \mathbf{y}_n \Delta \mathbf{s}_n$ mit gegebenen $K \times M$ Matrizen \mathbf{y}_n verwenden.

8.1.3 Matrix-T- \mathcal{J} -Transformation

Verwendet man Pseudoinverse bezüglich der Spurnorm aus Gl. (7.21), so erhält man für $M \times N$ Matrizen \mathbf{s}_n und $\boldsymbol{\omega}_n$ sowie $M \times M$ Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ den Algorithmus

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_n^{(0)} &= \mathbf{s}_n, & \boldsymbol{\omega}_n^{(0)} &= \boldsymbol{\omega}_n, \\ \mathbf{s}_n^{(k+1)} &= \mathbf{s}_{n+1}^{(k)} - \text{tr} \left(\Delta \mathbf{s}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{\text{tr}} \right) \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \boldsymbol{\omega}_n^{(k+1)} &= \mathbf{r}_{n+1}^{(k)} \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)} - \text{tr} \left([\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{\text{tr}} \Delta [\mathbf{r}_n^{(k)} \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}] \right) \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ {}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \mathbf{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.19)$$

Wir nennen dies die *Matrix-T- \mathcal{J} -Transformation*. Diese Variante iteriert die grundlegende Transformation

$$\mathbf{s}_n^{(1)} = \mathbf{s}_{n+1} - \text{tr} \left(\Delta \mathbf{s}_n [\Delta \boldsymbol{\omega}_n]^{\text{tr}} \right) \boldsymbol{\omega}_{n+1}, \quad (8.20)$$

die für Modellfolgen

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + c \boldsymbol{\omega}_n \quad (8.21)$$

mit Zahlen c exakt ist, in hierarchisch konsistenter Weise, indem als nächste Stufe der Hierarchie Modellfolgen der Form

$$\mathbf{s}_n = \mathbf{s} + (c_0 + c_1 \mathbf{r}_n) \boldsymbol{\omega}_n \quad (8.22)$$

betrachtet werden. Unter Verwendung der $M \times N$ Matrizen $\mathbf{u}_n^{(k)} = \mathbf{r}_n^{(k)} \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}$ erhält man den folgenden, alternativen Algorithmus:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_n^{(0)} &= \mathbf{s}_n, & \boldsymbol{\omega}_n^{(0)} &= \boldsymbol{\omega}_n, \\ \mathbf{s}_n^{(k+1)} &= \mathbf{s}_{n+1}^{(k)} - \text{tr} \left(\Delta \mathbf{s}_n^{(k)} [\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{\text{tr}} \right) \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \boldsymbol{\omega}_n^{(k+1)} &= \mathbf{u}_{n+1}^{(k)} - \text{tr} \left([\Delta \boldsymbol{\omega}_n^{(k)}]^{\text{tr}} \Delta [\mathbf{u}_n^{(k)}] \right) \boldsymbol{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ {}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \mathbf{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.23)$$

Zur Berechnung von Restabschätzungen für die nächste Stufe der Iteration kann man also auch anstelle der Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ die Matrizen $\mathbf{u}_n^{(k)}$ vorgeben.

Es gilt für jede Konstante a und jede $M \times N$ Matrix \mathbf{b}

$${}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{a \mathbf{s}_n + \mathbf{b}\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = a {}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) + \mathbf{b}. \quad (8.24)$$

Für beliebige Konstanten $a \neq 0$ gilt ferner

$${}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{a \boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = {}_T \mathbf{J}_n^{(k)}(\{\mathbf{s}_n\}, \{\boldsymbol{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}). \quad (8.25)$$

Als Restabschätzungen kann man hier wieder zum Beispiel $\boldsymbol{\omega}_n = \Delta \mathbf{s}_n$ oder $\boldsymbol{\omega}_n = (n + \beta) \Delta \mathbf{s}_n$ verwenden. Andere Möglichkeiten ergeben sich für $\boldsymbol{\omega}_n = \mathbf{y}_n \Delta \mathbf{s}_n$ mit gegebenen $M \times M$ Matrizen \mathbf{y}_n .

8.2 Varianten für Vektorfolgen

In diesem Abschnitt betrachten wir Verallgemeinerungen der skalaren \mathcal{J} -Transformation auf Vektorfolgen.

8.2.1 Vektor- \mathcal{J} -Transformation

Aus der Matrix-T- \mathcal{J} -Transformation wird bei Anwendung auf $d \times 1$ Matrizen, also Spaltenvektoren \vec{s}_n und $\vec{\omega}_n$ und Verwendung von $d \times d$ Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ der Algorithmus

$$\begin{aligned}
\vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\
\vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{s}_n^{(k)}}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\
\vec{\omega}_n^{(k+1)} &= \mathbf{r}_{n+1}^{(k)} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta[\mathbf{r}_n^{(k)} \vec{\omega}_n^{(k)}]}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\
{}_V \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}.
\end{aligned} \tag{8.26}$$

Wir nennen dies die *Vektor- \mathcal{J} -Transformation*. Man beachte, daß hier eigentlich Pseudoinverse $[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^-$ bezüglich eines Skalarproduktes auftreten (vgl. (7.1.1)). Diese Variante iteriert die grundlegende Transformation

$$\vec{s}_n^{(1)} = \vec{s}_{n+1} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n]^\dagger \Delta\vec{s}_n}{[\Delta\vec{\omega}_n]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n} \vec{\omega}_{n+1}, \tag{8.27}$$

die für Modellfolgen

$$\vec{s}_n = \vec{s} + c\vec{\omega}_n \tag{8.28}$$

mit Zahlen c exakt ist, in hierarchisch konsistenter Weise, indem als nächste Stufe der Hierarchie Modellfolgen der Form

$$\vec{s}_n = \vec{s} + (c_0 + c_1 \mathbf{r}_n) \vec{\omega}_n \tag{8.29}$$

betrachtet werden. Unter Verwendung der Vektoren $\vec{u}_n^{(k)} = \mathbf{r}_n^{(k)} \vec{\omega}_n^{(k)}$ erhält man den folgenden, alternativen Algorithmus:

$$\begin{aligned}
\vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\
\vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{s}_n^{(k)}}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\
\vec{\omega}_n^{(k+1)} &= \vec{u}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{u}_n^{(k)}}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\
{}_V \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}.
\end{aligned} \tag{8.30}$$

Zur Berechnung von Restabschätzungen für die nächste Stufe der Iteration kann man also auch anstelle der Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ die Vektoren $\vec{u}_n^{(k)}$ vorgeben.

Es gilt für jede Konstante a und jeden Vektor \vec{b}

$${}_v\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{a\vec{s}_n + \vec{b}\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = a {}_v\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) + \vec{b}. \quad (8.31)$$

Für beliebige Konstanten $a \neq 0$ gilt ferner

$${}_v\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{a\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}) = {}_v\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}). \quad (8.32)$$

Als Restabschätzungen kann man hier zum Beispiel $\vec{\omega}_n = \Delta\vec{s}_n$ oder $\vec{\omega}_n = (n + \beta)\Delta\vec{s}_n$ verwenden. Andere Möglichkeiten ergeben sich für $\vec{\omega}_n = \mathbf{y}_n\Delta\vec{s}_n$ mit gegebenen $d \times d$ Matrizen \mathbf{y}_n .

Als wichtigen Spezialfall geben wir den Algorithmus an, der sich ergibt, wenn die Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ Vielfache der Einheitsmatrix sind. Wir setzen $\mathbf{r}_n^{(k)} = r_n^{(k)}\mathbf{1}$. Dann gilt $\vec{u}_n^{(k)} = r_n^{(k)}\vec{\omega}_n^{(k)}$. Damit ergibt sich der Algorithmus

$$\begin{aligned} \vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\ \vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{s}_n^{(k)}}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \vec{\omega}_n^{(k+1)} &= -\frac{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \vec{\omega}_n^{(k)}}{[\Delta\vec{\omega}_n^{(k)}]^\dagger \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)} \Delta r_n^{(k)} \\ {}_v\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{r_n^{(k)}\mathbf{1}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.33)$$

8.2.2 Topologische \mathcal{J} -Transformation

Ähnlich wie bei den nichtskalaren ϵ -Algorithmen kann man durch Verwendung anderer Pseudoinverser anstelle der Pseudoinversen bezüglich eines Skalarproduktes weitere Algorithmen erhalten. Im Falle der Verwendung der Pseudoinversen bezüglich eines symmetrischen Produktes und eines weiteren Vektors $\vec{y} \neq 0$ aus Gl. (7.12) nennen wir den entsprechenden Algorithmus die *Topologische \mathcal{J} -Transformation*. Für d -dimensionale Vektoren \vec{s}_n , $\vec{\omega}_n$ und $\vec{y}_n^{(k)}$ sowie $d \times d$ Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ hat dieser Algorithmus die Form

$$\begin{aligned} \vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\ \vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta\vec{s}_n^{(k)}}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \vec{\omega}_n^{(k+1)} &= \mathbf{r}_{n+1}^{(k)} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta[\mathbf{r}_n^{(k)} \vec{\omega}_n^{(k)}]}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta\vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ {}_T\vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.34)$$

Diese Variante iteriert die grundlegende Transformation

$$\vec{s}_n^{(1)} = \vec{s}_{n+1} - \frac{[\vec{y}_n]^T \Delta \vec{s}_n}{[\vec{y}_n]^T \Delta \vec{\omega}_n} \vec{\omega}_{n+1}, \quad (8.35)$$

die bemerkenswerterweise für $\vec{\omega}_n = \vec{y}_n = \Delta \vec{s}_n$ in das modifizierte Aitken-Verfahren (7.70) übergeht und die für Modellfolgen

$$\vec{s}_n = \vec{s} + c \vec{\omega}_n \quad (8.36)$$

mit Zahlen c exakt ist, in hierarchisch konsistenter Weise, indem als nächste Stufe der Hierarchie Modellfolgen der Form

$$\vec{s}_n = \vec{s} + (c_0 + c_1 \mathbf{r}_n) \vec{\omega}_n \quad (8.37)$$

betrachtet werden. Unter Verwendung der Vektoren $\vec{u}_n^{(k)} = \mathbf{r}_n^{(k)} \vec{\omega}_n^{(k)}$ erhält man den folgenden, alternativen Algorithmus:

$$\begin{aligned} \vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\ \vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\Delta \vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{s}_n^{(k)}}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \vec{\omega}_n^{(k+1)} &= \vec{u}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{u}_n^{(k)}}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ {}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \quad (8.38)$$

Zur Berechnung von Restabschätzungen für die nächste Stufe der Iteration kann man also auch anstelle der Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ die Vektoren $\vec{u}_n^{(k)}$ vorgeben.

Es gilt für jede Konstante a und jeden Vektor Matrix \vec{b}

$${}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{a \vec{s}_n + \vec{b}\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) = a {}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) + \vec{b}. \quad (8.39)$$

Für beliebige Konstanten $a \neq 0$ gilt ferner

$${}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{a \vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) = {}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{\mathbf{r}_n^{(k)}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}). \quad (8.40)$$

Als Restabschätzungen kann man auch hier zum Beispiel $\vec{\omega}_n = \Delta \vec{s}_n$ oder $\vec{\omega}_n = (n + \beta) \Delta \vec{s}_n$ verwenden. Andere Möglichkeiten ergeben sich für $\vec{\omega}_n = \mathbf{Y}_n \Delta \vec{s}_n$ mit gegebenen $d \times d$ Matrizen \mathbf{Y}_n .

Als wichtigen Spezialfall geben wir den Algorithmus an, den man erhält, wenn die Matrizen $\mathbf{r}_n^{(k)}$ Vielfache der Einheitsmatrix sind. Wir setzen $\mathbf{r}_n^{(k)} = r_n^{(k)} \mathbf{1}$. Dann gilt $\vec{u}_n^{(k)} =$

$r_n^{(k)} \vec{\omega}_n^{(k)}$. Damit ergibt sich der Algorithmus

$$\begin{aligned} \vec{s}_n^{(0)} &= \vec{s}_n, & \vec{\omega}_n^{(0)} &= \vec{\omega}_n, \\ \vec{s}_n^{(k+1)} &= \vec{s}_{n+1}^{(k)} - \frac{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{s}_n^{(k)}}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)}, \\ \vec{\omega}_n^{(k+1)} &= -\frac{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \vec{\omega}_n^{(k)}}{[\vec{y}_n^{(k)}]^T \Delta \vec{\omega}_n^{(k)}} \vec{\omega}_{n+1}^{(k)} \Delta r_n^{(k)} \\ {}_T \vec{\mathcal{J}}_n^{(k)}(\{\vec{s}_n\}, \{\vec{\omega}_n\}, \{r_n^{(k)} \mathbf{1}\}, \{\vec{y}_n^{(k)}\}) &= \vec{s}_n^{(k)}. \end{aligned} \tag{8.41}$$

8.3 Numerische Beispiele

Als ein Beispiel für die Anwendung von Vektor- und Matrizenextrapolationsverfahren betrachten wir die Berechnung der Matrixexponentialfunktion $\exp(\mathbf{A})$. Diese ist von Interesse bei der Lösung von Evolutionsgleichungen für Matrizen der Form

$$\frac{d}{dt} \mathbf{U}(t) = \mathbf{K}(t) \mathbf{U}(t), \quad \mathbf{U}(0) = \mathbf{U}_0, \tag{8.42}$$

wobei nach einer Diskretisierung der Zeitvariablen gemäß

$$\mathbf{U}(t + \Delta t) \approx \exp(\mathbf{K}(t)\Delta t) \mathbf{U}(t) = \exp(\mathbf{A}) \mathbf{U}(t) \tag{8.43}$$

die Berechnung der Matrixexponentialfunktion von

$$\mathbf{A} = \mathbf{K}(t)\Delta t \tag{8.44}$$

erforderlich ist. Wir nennen folgende Beispiele

- Die eindimensionale Wärmeleitungs- bzw. Diffusionsgleichung in geeigneten Einheiten

$$\frac{\partial}{\partial t} u(x, t) = \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x, t) \tag{8.45}$$

für

$$0 < x < 1, \quad t > 0, \quad u(0, t) = u(1, t) = 0, \quad u(x, 0) = u_0(x) \tag{8.46}$$

wird durch Diskretisierung gemäß

$$x_j = j \Delta x, \quad U_j(t) = u(x_j, t) \tag{8.47}$$

und mit einer zentralen Differenzennäherung für die zweite Ableitung gelöst. Man erhält so

$$\frac{d}{dt} U_j(t) \approx (U_{j+1}(t) - 2U_j(t) + U_{j-1}(t))/(\Delta x)^2. \tag{8.48}$$

Dies ist von der Form der Gl. (8.42) mit einer tridiagonalen, zeitunabhängigen Matrix \mathbf{K} .

- Die zeitabhängige Schrödingergleichung

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = \hat{H}(t) \psi(t) \quad (8.49)$$

hat nach Einführung einer Basis für die Wellenfunktion mit einer resultierenden Matrixdarstellung des Hamilton-Operators die Form der Gl. (8.42).

Auch die Berechnung von Dichtematrizen, also Matrixdarstellungen des Operators

$$\rho = \exp(-\beta \hat{H}) / \text{tr}(\exp(-\beta \hat{H})), \quad (8.50)$$

führen auf die Berechnung der Matrixexponentialfunktion, wie auch die Berechnung des Operators $\exp(-(i/\hbar) t \hat{H}_0)$, der bei der Transformation auf die Wechselwirkungsdarstellung auftritt.

Die Berechnung der Matrixexponentialfunktion war daher das Thema umfangreicher Untersuchungen. In einem berühmten Review vergleichen Moler und van Loan insgesamt 19 verschiedene Methoden zur Berechnung, die meist allerdings nicht überzeugen konnten. [253] Die Berechnung dieser Funktion ist auch in Lehrbüchern über Matrizenrechnung thematisiert [133]. Zu den erwähnten 19 Methoden sind inzwischen weitere hinzugekommen [227, 341, 349, 362].

Ohne behaupten zu wollen, mit den im folgenden vorgestellten Methoden die ultimative Methode zur Berechnung der Matrixexponentialfunktion gefunden zu haben, scheinen die Resultate aber zumindest vielversprechend zu sein.

Die vorgeschlagene Methode stützt sich, wie im Abschnitt 7.1.3 dargelegt, auf die Potenzreihenentwicklung, die im Falle der Matrixexponentialfunktion durch

$$\exp(\mathbf{A}) = \sum_{j=0}^{\infty} \mathbf{A}^j / j! \quad (8.51)$$

gegeben ist. Die Partialsummen

$$\mathbf{F}_n = \sum_{j=0}^n \mathbf{A}^j / j! \quad (8.52)$$

werden als Eingabe für Extrapolationsverfahren benutzt. Wie schon mehrfach erwähnt, kann man diese Matrizenfolge auch als Vektorfolge auffassen, indem man die Elemente der jeweiligen Matrix mit Vektorkomponenten identifiziert. Dies ist vorteilhaft, da man so Vektorextrapolationsverfahren verwenden kann und Matrizenextrapolationsverfahren mit Matrixinversen vermeiden kann, wie sie beispielsweise in der modifizierten Padé-Methode von Lin und Hwang [227] auftreten.

Zu beachten ist, daß man etwaige Konvergenzprobleme für große Werte von $\text{tr}(\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A})$ im Falle der Matrixexponentialfunktion dadurch umgehen kann, daß man die Beziehung

$$\exp(\mathbf{A}) = (\exp(\mathbf{A}/L))^L \quad (8.53)$$

Tabelle 8.1: Matrixexponentialfunktion: Definitionen

N	:	Gesamtzahl benutzter Partialsummen
n	:	Index des entsprechenden Folgeelemente \vec{s}_n
A_N	:	$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{A^j}{j!}$
B_N	:	$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{B^j}{j!}$
C_N	:	$\sum_{j=0}^{N-1} \frac{C^j}{j!}$

ausnützt. Man berechnet in diesem Falle also $\exp(\mathbf{A}/L)$ und hat dann noch Potenzen dieser Matrix auszuführen. Ist insbesondere $L = 2^l$ mit $l \in \mathbb{N}$, so kann man den letzten Schritt durch wiederholtes Quadrieren ausführen, was zu Kostenreduktion führt [227, 253].

Behandelt wird die Berechnung der Matrixexponentialfunktion für die Matrizen

$$A = \begin{pmatrix} -0.001 & -0.2 & -0.3 \\ -0.4 & -0.5 & -0.6 \\ -0.7 & -0.8 & -0.9 \end{pmatrix} \quad (8.54)$$

$$B = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 & 0.1 \\ -5 & -5 & -5 & -5 & -5 \\ 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.3 & 0.3 \\ 0.01 & 0.01 & 0.01 & 0.01 & 0.01 \end{pmatrix} \quad (8.55)$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \quad (8.56)$$

In den folgenden Tabellen werden die in Tabelle 8.1 angegebenen Bezeichnungen benutzt. Es wurde als zu beschleunigende Folge $\mathbf{s}_n = \mathbf{F}_{N-1}$ bzw. $\vec{s}_n = \vec{F}_{N-1}$ verwendet, wobei $N = n + m$ mit $m \geq 1$ galt. Das bedeutet, daß auch die Möglichkeit untersucht wurde, erst ab der m -ten Partialsumme mit der Beschleunigung zu beginnen.

Aufgetragen sind jeweils die Zahl der exakten Stellen, also der negative dekadische Logarithmus des relativen Fehlers. Dieser ist für eine Näherung \mathbf{x} für die Exponentialfunktion einer Matrix \mathbf{A} durch $\|\mathbf{x} - \exp(\mathbf{A})\|/\|\exp(\mathbf{A})\|$ definiert, wobei die Matrixnorm $\|\mathbf{y}\|^2 = \text{tr}(\mathbf{y}^\dagger \mathbf{y})$ verwendet wird.

In Tabelle 8.2 wird das DIIS-Verfahren angewandt. Die Daten zeigen, daß dieses Verfahren im Falle der Berechnung der Matrixexponentialfunktion über die Potenzreihe eine

Tabelle 8.2: Matrixexponentialfunktion: DIIS-Verfahren

$N=n+4$	A_N	DIIS	$N=n+11$	A_N	DIIS
4	0.9	0.9	11	5.6	5.6
5	1.4	0.9	12	6.5	5.6
6	1.9	2.8	13	7.4	8.6
7	2.5	3.4	14	8.3	8.5
8	3.2	3.6	15	9.3	10.2
9	4.0	4.1	16	10.3	9.3
10	4.8	3.6	17	11.3	10.0
11	5.6	4.0	18	12.4	11.3
12	6.5	4.2	19	13.4	12.4

$N=n+9$	B_N	DIIS	$N=n+17$	B_N	DIIS
9	0.7	0.7	17	5.2	5.2
10	1.2	0.7	18	5.9	5.2
11	1.7	2.9	19	6.7	8.1
12	2.2	2.4	20	7.4	8.8
13	2.7	1.7	21	8.2	7.6
14	3.3	2.7	22	9.0	8.4
15	3.9	3.5	23	9.8	8.1
16	4.6	2.4	24	10.6	9.0
17	5.2	3.1			

$N=n+31$	C_N	DIIS	$N=n+41$	C_N	DIIS
31	3.2	3.2	41	6.8	6.8
32	3.5	3.2	42	7.2	6.8
33	3.8	4.8	43	7.7	8.9
34	4.2	5.2	44	8.1	8.9
35	4.5	5.4	45	8.6	9.6
36	4.9	5.5	46	9.0	8.7
37	5.2	6.1	47	9.5	9.4
38	5.6	6.0	48	10.0	9.6
39	6.0	5.9	49	10.5	9.1

Tabelle 8.3: Matrixexponentialfunktion: ϵ -Algorithmen

$N=n+1$	A_N	Top. ϵ		$N=n+2$	A_N	Vektor- ϵ	
1	0.3	0.3		3	0.5	0.5	
3	0.5	1.2		5	1.4	2.2	
5	1.4	2.7		7	2.5	4.1	
7	2.5	4.3		9	4.0	6.2	
9	4.0	6.8		11	5.6	8.4	
11	5.6	8.0		13	7.4	10.7	
13	7.4	10.9					
15	9.3	12.7					
17	11.3	15.2					

$N=n+1$	B_N	Top. ϵ		$N=n+1$	B_N	Vektor- ϵ	
3	-0.5	0.6		1	0.1	0.1	
5	-0.4	1.4		3	-0.5	0.6	
7	0.0	2.5		5	-0.4	1.4	
9	0.7	3.9		7	0.0	2.5	
11	1.7	5.4		9	0.7	3.9	
13	2.7	7.0		11	1.7	5.4	
15	3.9	8.8		13	2.7	7.0	
17	5.2	10.7		15	3.9	8.8	
19	6.7	12.8		17	5.2	10.7	
21	8.2	14.8					

$N=n+1$	C_N	Top. ϵ	Vektor- ϵ	$N=n+31$	C_N	Top. ϵ	Vektor- ϵ
31	3.2	3.2	4.1	33	3.8	4.8	4.8
33	3.8	6.4	5.4	35	4.5	6.2	6.2
35	4.5	6.1	6.3	37	5.2	7.7	7.7
37	5.2	6.9	7.3	39	6.0	9.1	9.1
39	6.0	8.6	8.7	41	6.8	10.6	10.6
41	6.8	9.4	—	43	7.7	12.1	—
49	10.5	13.2	—	45	8.6	13.8	—
51	11.5	14.2	—	47	9.5	13.9	—
53	12.5	13.8	—	49	10.5	13.8	—
				51	11.5	13.8	—

Tabelle 8.4: Matrixexponentialfunktion: Vektor- \mathcal{J} -Transformation

$N=n+1$	A_N	Vektor- \mathcal{J}	$N=n+1$	B_N	Vektor- \mathcal{J}
1	0.3	0.3	1	0.1	0.1
3	0.5	2.1	3	-0.5	1.0
5	1.4	4.3	5	-0.4	2.4
7	2.5	6.9	7	0.0	4.1
9	4.0	9.7	9	0.7	6.2
11	5.6	12.6	11	1.7	8.5
13	7.4	15.5	13	2.7	11.0
15	9.3	15.1	15	3.9	13.6
17	11.3	15.2	17	5.2	15.3
19	13.4	15.2	19	6.7	15.4

$N=n+1$	C_N	Vektor- \mathcal{J}	$N=n+31$	C_N	Vektor- \mathcal{J}
11	0.0	-0.6	31	3.2	3.2
13	0.1	1.2	33	3.8	5.3
15	0.2	3.4	35	4.5	6.5
17	0.4	4.8	37	5.2	7.9
19	0.6	6.7	39	6.0	9.5
21	0.9	8.7	41	6.8	11.3
23	1.2	10.6	43	7.7	13.1
25	1.6	13.0	45	8.6	15.0
27	2.1	13.1	47	9.5	15.3
29	2.6	12.6	49	10.5	15.2

leichte Konvergenzverbesserung bewirkt, aber nur, wenn zwei Kriterien erfüllt sind: Das Verfahren darf erst eingesetzt werden, wenn die Terme hinreichend klein sind, und es dürfen nicht mehr als einige wenige Terme der Folge benutzt werden. Sonst kann es sein, daß die mit dem DIIS-Verfahren berechneten Näherungen sogar langsamer als die Problemfolge konvergieren.

In Tabelle 8.3 werden der topologische und der vektorielle ϵ -Algorithmus verwandt. Die Daten zeigen, daß die nichtskalaren ϵ -Algorithmen für die betrachteten Beispiele effizienter als das DIIS-Verfahren sind. Der topologische und der Vektor- ϵ -Algorithmus verhalten sich ziemlich ähnlich. Im Falle des Vektor- ϵ -Algorithmus ist es allerdings manchmal aufgrund von Restriktionen des verwendeten Programs [59, Programm EPSVEC] nicht möglich, zu höheren Werten von n zu gelangen. Dies ist in der Tabelle durch einen Bindestrich angedeutet.

In Tabelle 8.4 sind Ergebnisse dargestellt, die man bei Anwendung der Vektor- \mathcal{J} -Transformation der Form ${}_v\vec{\mathcal{J}}_0^{(n)}(\{\vec{s}_n\}, \{\Delta\vec{s}_n\}, \{(n+1)^{-1}\mathbf{1}\})$ erhält. Das heißt, daß eine \tilde{t} -Variante benutzt wurde, und daß als $\mathbf{r}_n^{(k)}$ der Einfachheit für alle k gleiche, n -abhängige Vielfache der Einheitsmatrix verwendet wurden, wie sie auch in einer skalaren ${}_1\mathbf{J}$ -Transformation mit $\beta = 1$ zur Anwendung kommen würden.

Die Daten in Tabelle 8.4 deuten im Vergleich mit denen in Tabellen 8.2 und 8.3 darauf hin, daß für die untersuchten Fälle die Vektor- \mathcal{J} -Transformation die erfolgreichste Extrapolationsmethode darstellt.

Teil II

Anwendungen

Kapitel 9

Anwendung auf die Berechnung der Linienform spektraler Löcher

Eines der grundlegenden Probleme der Molekülspektroskopie ist die Eliminierung der inhomogenen Verbreiterung der Spektrallinien mit dem Ziel, Linienformen mit der homogenen Linienbreite zu bestimmen. Dies kann man mit einer wichtigen spektroskopischen Methode erreichen, dem spektralen Lochbrennen. Dabei wird durch Einstrahlen mit einem scharfbandigen Laser in die inhomogene Verteilung die Zahl der Moleküle mit Übergangsfrequenzen in einem schmalen Frequenzbereich verkleinert, was man als Brennen eines Loches in die Verteilung auffassen kann. Dieses Loch wird durch einen zweiten Laserstrahl detektiert.

9.1 Beschreibung des Modells

Um die Linienformfunktionen im Detail zu erklären und daraus molekulare Parameter zu extrahieren, werden üblicherweise relativ einfache Modelle verwendet [88, 91, 102, 103, 167, 203, 261]. Im Modell für optisch dünne Proben von Drescher und Dick [103], das im folgenden in seinen Grundzügen beschrieben wird, entspricht das Brennen des Loches einem Übergang $a \rightarrow b$ zwischen Zuständen a und b eines Moleküls mit nachfolgendem Übergang zu einem Reservoirzustand r nach einem einfachen, exponentiellen Zerfallsgesetz ohne Rückbesetzung. Die Übergangsfrequenzen ω_{ba} sind inhomogen verbreitert, und das Zentrum der inhomogenen Verteilung liegt bei ω_{ba}^0 . Entsprechend entspricht die Detektion einem Übergang zwischen Zuständen a und c mit entsprechend verbreiterten Übergangsfrequenzen ω_{ca} mit Zentrum bei ω_{ca}^0 . Man beschränkt sich auf die Nullphononanteile in der homogenen Spektralfunktion sowohl für Brennen und Detektieren, für die Lorentz-Form

$$\sigma_{ab}^z(\omega) = \sigma_{ab}^0 f_{ab} \frac{\Gamma_{ab}/\pi}{(\omega - \omega_{ba}^0)^2 + \Gamma_{ab}^2}, \quad \sigma_{ac}^z(\omega) = \sigma_{ac}^0 f_{ac} \frac{\Gamma_{ac}/\pi}{(\omega - \omega_{ca}^0)^2 + \Gamma_{ac}^2} \quad (9.1)$$

angenommen wird, wobei Γ_{ab} und Γ_{ac} die Halbwertsbreiten, f_{ab} und f_{ac} Debye-Waller-Faktoren (entsprechend dem Verhältnis von Nullphononanteilen und den Phononensei-

tenbanden des homogenen Spektrums) sowie σ_{ab}^0 und σ_{ac}^0 die integrierten Absorptionsquerschnitte sind. Dann kann man die Linienform des spektralen Loches beziehungsweise die normierte Lochfunktion

$$\hat{H}(\omega, \omega_B) = (A_0(\omega) - A(\omega, \omega_B))/A_0(\omega), \quad (9.2)$$

mit dem Absorptionsspektrum A_0 vor dem Brennen und dem Absorptionsspektrum A nach dem Brennen, berechnen, wenn die normierten Linienformfunktionen [103]

$$\begin{aligned} \hat{F}_n^z(\omega_P, \omega_B) = f_{ac} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^1 & \left\{ 1 - \exp \left(\frac{-Y q^2 \Gamma_{ab}/\pi}{(\omega_B - x - \omega_{ba}^0)^2 + \Gamma_{ab}^2} \right) \right\} q^n dq \\ & \times \frac{\Gamma_{ac}/\pi}{(\omega_P - x - \omega_{ca}^0)^2 + \Gamma_{ac}^2} dx, \end{aligned} \quad (9.3)$$

für $n = 0$ und $n = 2$ bekannt sind. Hier ist ω_P die Detektionsfrequenz, ω_B ist die Brennfrequenz und $Y = f_{ab} \Phi \sigma_{ab}^0 F_B t$ ist ein kombinierter Parameter, der proportional der Quantenausbeute Φ , dem Photonenfluß F_B und der Brennzeit t ist. Die q -Integration entspricht dabei einer Orientierungsmittelung über das nach polarisiertem Brennen anisotrope Ensemble [91]. Die x -Integration entspricht einer Faltung im Frequenzbereich. Der Index z deutet jeweils auf den Nullphonon(*zero-phonon*)-Anteil und wird im folgenden unterdrückt.

Wir beschränken uns auf resonante Löcher, für die die Zustände b und c identisch sind. Unter dieser Voraussetzung erfüllt die normierte Lochfunktion je nach Polarisation die einfachen Beziehungen

$$H_{\parallel} = 3F_2 \quad (9.4)$$

für den Fall, daß die Polarisationsrichtungen von Brenn- und Detektionslaser zueinander parallel stehen, und

$$H_{\perp} = 3(F_0 - F_2)/2 \quad (9.5)$$

für den Fall, daß sie aufeinander senkrecht stehen. Der Polarisationsgrad ρ ist durch

$$\rho = \frac{H_{\parallel} - H_{\perp}}{H_{\parallel} + H_{\perp}} \quad (9.6)$$

definiert.

9.2 Einfache Darstellungen für die Faltungsintegrale

Zu berechnen sind demnach die Faltungsintegrale F_n bzw. die Integrale

$$G_n(x_0, Y, \gamma, \gamma') = \int_0^1 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma'/\pi}{(x - x_0)^2 + \gamma'^2} \left(\exp \left[-\frac{Y q^2 \gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2} \right] - 1 \right) dx \right\} q^n dq \quad (9.7)$$

für $n = 0, 2$, mit reellem x_0 (entsprechend dem Frequenzabstand zwischen Brenn- und Detektionslaser im Falle resonanter Löcher) und positiven Parametern γ, γ' und Y .

Wir bemerken, daß diese Integrale die Skaleneigenschaft [168]

$$G_n(x_0, Y, \gamma, \gamma') = G_n(x_0/\sigma, Y/\sigma, \gamma/\sigma, \gamma'/\sigma), \quad (\sigma > 0). \quad (9.8)$$

besitzen, die man mit Hilfe einer Koordinatentransformation $x \rightarrow \sigma x$ beweist. Dies bedeutet eine Reduktion der Zahl unabhängiger Parameter und erlaubt, einen der Parameter, also zum Beispiel γ , gleich Eins zu setzen. Physikalisch bedeutet das, daß dieser Parameter als Einheit der Energie bzw. Wellenzahl verwendet wird.

Die effiziente Auswertung solcher Faltungsintegrale ist trotz der relativ einfachen mathematischen Form ein nichttriviales Problem, insbesondere für große Y . Wir diskutieren zunächst einige einfache Darstellungen. Eine große Anzahl von weiteren Darstellungen findet man bei Homeier und Dick [168].

9.2.1 Integraldarstellung

Automatische Quadratur durch Rückführung auf eindimensionale Integrale über Fehlerfunktionen ist möglich, aber zeitaufwendig [102]. Verwandt ist der folgende Zugang über eine eindimensionale Integraldarstellung.

Verwendet man die in Gl. (4.25) definierten F_m -Funktionen, die aus der Quantenchemie bekannt sind, so kann man die q -Integration in Gl. (9.7) ausführen und erhält eine eindimensionale Integraldarstellung

$$g_n = G_n(x_0, Y, \gamma, \gamma') + \frac{1}{n+1} = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma'/\pi}{(x-x_0)^2 + \gamma'^2} F_{n/2} \left(\frac{Y\gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2} \right) dx \right\}. \quad (9.9)$$

Jetzt kann man eine automatische Quadratur nach der Verwendung einer Möbius-Transformation [170] als Variablensubstitution

$$x = \Xi \cdot \begin{cases} \frac{1+t}{1-t} & \text{für } x > 0 \\ -\frac{1+t}{1-t} & \text{für } x < 0 \end{cases} \quad (9.10)$$

mit $t \in (-1, 1)$ und $\Xi > 0$ auch für große Y ohne Probleme durchführen. Allerdings ist auch dieses Quadraturverfahren relativ zeitaufwendig.

9.2.2 Taylor-Reihe

Ein Zugang über Taylor-Reihen [203] führt auf Reihen einfacherer Faltungsintegrale, die als *reduzierte Integrale* bezeichnet werden. Für diese wurden von Kador, Schulte und Haarer komplexe Darstellungen unter Verwendung des Residuenkalküls hergeleitet. Außerdem berichteten diese Autoren von langsamer Konvergenz der Reihen, besonders für lange Brennzeiten. [203]

In diesem Zugang verwendet man die Taylor-Reihe der Exponentialfunktion in Gl. (9.7) und führt die q -Integration aus. Es ergibt sich

$$G_n(x_0, Y, \gamma, \gamma') = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-Y)^k}{k!(2k+n+1)} S_k(x_0, \gamma, \gamma') \quad (9.11)$$

mit den reduzierten Integralen

$$S_k(x_0, \gamma, \gamma') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma'/\pi}{(x-x_0)^2 + \gamma'^2} \left\{ \frac{\gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2} \right\}^k dx \quad (9.12)$$

Darstellungen für die reduzierten Integrale

Fourier-Transformation liefert unter Verwendung des Faltungstheorems

$$S_k(x_0, \gamma, \gamma') = \frac{\pi}{2^{k-1} \gamma^{2k-1} (k-1)!} \left[\frac{\gamma}{\pi} \right]^k \frac{1}{2\pi} \times 2\Re \int_0^{\infty} \exp(ipx_0) \hat{k}_{k-1/2}(\gamma p) \hat{k}_{1/2}(\gamma' p) dp \quad (9.13)$$

Hier treten die in Gl. (3.220) definierten reduzierten Bessel-Funktionen auf, die die Darstellung

$$\hat{k}_{k-1/2}(z) = \exp(-z) \sum_{j=0}^{k-1} \frac{(k-1+j)!}{j!(k-1-j)!} 2^{-j} z^{k-1-j} \quad (9.14)$$

besitzen (vgl. z.B. [158, Gl. (3.2-3a)]). Einsetzen dieser Darstellung erlaubt die Ausführung der p -Integration mit dem Resultat [168]

$$S_k(x_0, \gamma, \gamma') = \frac{1}{2^{k-1} \pi^k} \sum_{j=0}^{k-1} \frac{\binom{k}{j}}{j!} 2^{-j} \gamma^{-j} \frac{\cos((k-j) \arctan(x_0/[\gamma + \gamma']))}{([\gamma + \gamma']^2 + x_0^2)^{(k-j)/2}} \quad (9.15)$$

Alternativ kann man die Darstellung [168]

$$S_k(x_0, \gamma, \gamma') = \left[\frac{\gamma}{\pi} \right]^k \frac{\sum_{j=0}^{k-1} x_0^{2j} \sum_{m=0}^{2k-1-2j} c_{m,j,k} \gamma^{1-2k+m} \gamma'^{2k-1-m-2j}}{2^{2k-2} (x_0^2 + [\gamma + \gamma']^2)^k} \quad (9.16)$$

benutzen, wobei die Koeffizienten über die Rekursion

$$c_{m,j,k+1} = \frac{2}{k} \left\{ (2k-1-m)c_{m,j-1,k} + (2k-1-m)c_{m,j,k} + (6k-2m)c_{m-1,j,k} + (4k+1-m)c_{m-2,j,k} \right\} \quad (9.17)$$

mit den Anfangs- und Randbedingungen

$$c_{0,0,1} = c_{1,0,1} = 1, \quad c_{m,j,k} = 0 \quad \text{für} \quad \begin{cases} j < 0 \text{ oder } j \geq k \\ m < 0 \text{ oder } m \geq 2k - 2j \end{cases} \quad \text{sowie} \quad (9.18)$$

berechnet werden können.

Außerdem gilt [168]

$$S_m(x_0, \gamma, \gamma') \sim \frac{\gamma'/\pi}{x_0^2 + \gamma'^2} [\pi\gamma]^{-m} (\pi\gamma^2/m)^{1/2}, \quad m \rightarrow \infty. \quad (9.19)$$

Eine Anzahl weiterer Darstellungen für die reduzierten Integrale findet man bei Ho-meier und Dick [168].

9.2.3 Modifizierte Reihendarstellung

Einsetzen des Additionstheorems der F_m -Funktionen [358, Theorem 14.1],[359, Gl. (2)]

$$F_m(x+y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-x)^j}{j!} F_{m+j}(y) \quad (9.20)$$

in die Integraldarstellung (9.9) liefert die modifizierte Reihenentwicklung

$$g_n(x_0, Y, \gamma, \gamma') = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{j!} \left[\frac{-Y\gamma}{\pi(\xi^2 + \gamma^2)} \right]^j F_{j+n/2} \left(\frac{Y\gamma/\pi}{\xi^2 + \gamma^2} \right) K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma') \quad (9.21)$$

mit den modifizierten reduzierten Integralen

$$K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\gamma'/\pi}{(x-x_0)^2 + \gamma'^2} \left\{ \frac{\xi^2 - x^2}{x^2 + \gamma^2} \right\}^j dx \quad (9.22)$$

und dem freien, reellen Parameter ξ .

Interessanterweise ergibt sich für $\xi = 0$ eine modifizierte Reihe, die nur Terme mit positivem Vorzeichen enthält. Dies eröffnet die Möglichkeit, die ursprünglichen Integrale ohne Stellenverluste aufgrund von Auslöschungen zu berechnen, sofern man die modifizierten reduzierten Integrale $K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma')$ genau berechnen kann.

Darstellungen für die modifizierten reduzierten Integrale

Die Integrale $K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma')$ sind ebenfalls Faltungsintegrale.

Koordinatentransformation $x \rightarrow 1/x$ liefert

$$K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma') = (-1)^j \frac{\xi^{2j}}{\gamma^{2j}} K_j(\tilde{x}_0, \xi^{-1}, \gamma^{-1}, \tilde{\gamma}') \quad (9.23)$$

mit

$$\tilde{x}_0 = \frac{x_0}{x_0^2 + \gamma'^2}, \quad \tilde{\gamma}' = \frac{\gamma'}{x_0^2 + \gamma'^2} \quad (9.24)$$

Eine Darstellung als endliche Linearkombination reduzierter Integrale S_m erhält man durch Verwendung der Identität

$$\frac{a-u}{u+b} = -1 + \frac{a+b}{u+b} \quad (9.25)$$

mit $a = \xi^2$, $b = \gamma^2$ und $u = x^2$ in der Definition (9.22). Die j -te Potenz kann man dann über das Binomialtheorem expandieren und die resultierenden x -Integrale als reduzierte Integrale S_m identifizieren. Man erhält

$$K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma') = (-1)^j \sum_{m=0}^j (-1)^m \binom{j}{m} (\xi^2 + \gamma^2)^m \left[\frac{\pi}{\gamma} \right]^m S_m(x_0, \gamma, \gamma') \quad (9.26)$$

oder auch

$$K_j(x_0, \xi, \gamma, \gamma') = \frac{\xi^{2j}}{\gamma^{2j}} \sum_{m=0}^j (-1)^m \binom{j}{m} (\xi^{-2} + \gamma^{-2})^m [\pi\gamma]^m S_m(\tilde{x}_0, \gamma^{-1}, \tilde{\gamma}'). \quad (9.27)$$

Diese Darstellungen werden allerdings für größere j numerisch instabil. Dann ist eine numerische Quadratur für K_j vorzuziehen.

9.2.4 Asymptotische Darstellung

Für große Y ist die Konvergenz der bisher angegebenen Reihendarstellungen unbefriedigend. Es soll daher noch eine asymptotische Darstellung für $Y \rightarrow \infty$ angegeben werden.

Direkt aus der Definition erhält man die inhomogene, lineare Differentialgleichung

$$\frac{\partial g_n}{\partial Y} + \frac{n+1}{2Y} g_n = I_n(Y), \quad g_n(Y) = Y^{-(n+1)/2} \left(h_n + \int^Y Y^{(n+1)/2} I_n(Y) dY \right) \quad (9.28)$$

mit

$$\begin{aligned} I_n(Y) &= \frac{1}{2Y} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{Y\gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2}\right) \frac{\gamma'/\pi}{(x-x_0)^2 + \gamma'^2} dx \\ &= \frac{1}{2Y^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\gamma w^2}{\pi(1+w^2\gamma^2/Y)}\right) \frac{\tilde{\gamma}'/\pi}{(w/\sqrt{Y} - \tilde{x}_0)^2 + \tilde{\gamma}'^2} dw \\ &= \frac{1}{2} \frac{\gamma'}{\sqrt{\gamma}} \left(\frac{1}{Y^{3/2}}\right) + \frac{1}{8} \frac{\gamma'\pi}{\gamma^{3/2}} (6x_0^2 - 2\gamma'^2 + 3\gamma^2) \left(\frac{1}{Y^{5/2}}\right) \\ &\quad + \frac{3}{64} \frac{\gamma'\pi^2}{\gamma^{5/2}} (60\gamma^2 x_0^2 - 20\gamma^2 \gamma'^2 + 15\gamma^4 + 40x_0^4 - 80x_0^2 \gamma'^2 + 8\gamma'^4) \left(\frac{1}{Y^{7/2}}\right) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (9.29)$$

für große Y . Damit ergeben sich als asymptotische Lösungen der Differentialgleichung

$$\begin{aligned} g_0(Y) &= h_0/Y^{1/2} + \frac{1}{2} \frac{\gamma'}{\sqrt{\gamma}} Y^{-1/2} \ln(Y) \\ &\quad + \frac{1}{8} \frac{\gamma'\pi}{\gamma^{3/2}} (6x_0^2 - 2\gamma'^2 + 3\gamma^2) (-Y^{-3/2}) \\ &\quad + \frac{3}{64} \frac{\gamma'\pi^2}{\gamma^{5/2}} (60\gamma^2 x_0^2 - 20\gamma^2 \gamma'^2 + 15\gamma^4 + 40x_0^4 - 80x_0^2 \gamma'^2 + 8\gamma'^4) \frac{Y^{-5/2}}{(-2)} \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (9.30)$$

sowie

$$\begin{aligned}
g_2(Y) &= h_2/Y^{3/2} + \frac{1}{2} \frac{\gamma'}{\sqrt{\gamma}} Y^{-1/2} \\
&+ \frac{1}{8} \frac{\gamma' \pi}{\gamma^{3/2}} (6 x_0^2 - 2 \gamma'^2 + 3 \gamma^2) Y^{-3/2} \ln(Y) \\
&+ \frac{3}{64} \frac{\gamma' \pi^2}{\gamma^{5/2}} (60 \gamma^2 x_0^2 - 20 \gamma^2 \gamma'^2 + 15 \gamma^4 + 40 x_0^4 - 80 x_0^2 \gamma'^2 + 8 \gamma'^4) \frac{Y^{-5/2}}{(-1)} \\
&+ \dots
\end{aligned} \tag{9.31}$$

Abgesehen von den logarithmischen Termen handelt es sich also um Entwicklungen nach halbzahligen Potenzen $Y^{-(2j-1)/2}$. Unter Verwendung von Maple war es möglich, diese Entwicklungen jeweils bis zur Ordnung $O(Y^{-27/2})$ fortzusetzen. Diese Ausdrücke sind sehr länglich und bringen für das Verständnis nicht wesentlich Neues, weshalb auf ihre Auflistung verzichtet wurde. Sie wurden allerdings als Grundlage entsprechender Computerprogramme verwandt.

9.3 Verwendung von Extrapolationsverfahren

Wir sind an der Berechnung der Linienform resonanter Löcher interessiert und betrachten daher numerische Verfahren für den Fall $\gamma = \gamma'$.

Wir zeigen zunächst, daß man sowohl die Taylor-Reihe als auch die asymptotische Entwicklung mit geeigneten Varianten von Levin-artigen Transformationen beschleunigen kann.

Gleichung (9.19) impliziert, daß der Schwanz der Taylor-Reihe (9.11) wie der Schwanz der einfacheren Reihe in

$$\frac{\gamma'/\pi}{x_0^2 + \gamma'^2} [\pi \gamma^2]^{1/2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-Y/[\pi \gamma])^m}{m!(2m + \nu + 1)m^{1/2}} \tag{9.32}$$

konvergiert. Diese Reihe konvergiert offensichtlich etwas schneller als die Taylor-Reihe $f(Y/[\pi \gamma])$ mit $f(z) = \exp(-z) - 1$.

Für große Werte des Argumentes $z = Y/[\pi \gamma]$ wird die Konvergenz der Taylor-Reihe (9.32) allerdings relativ langsam, da die Terme a_m zunächst betragsmäßig mit m stark steigen ($|a_m| \propto z^m$) und erst ab $m \approx z$ betragsmäßig fallen ($a_{m+1}/a_m \approx -z/(m+1)$ für große m). Dies trifft auch auf die Taylor-Reihe (9.11) zu. Damit häufen sich auch für große z auch Rundungsfehler, wenn man die alternierende Reihe termweise aufsummiert. Diese Probleme sind analog zu den numerischen Problemen, die bei der Berechnung von $\exp(-z)$ für große positive Argumente z mittels der Taylor-Reihe der Exponentialfunktion auftreten, da dann eine sehr kleine Zahl als Linearkombination von großen Zahlen ausgedrückt werden muß.

Da das asymptotische Verhalten der Terme der Reihe bekannt ist, kann man es aber in Kombination mit Beschleunigungsverfahren auszunutzen versuchen.

Im Anhang C wird gezeigt, daß die Reihe mit Partialsummen

$$\hat{s}_n = \frac{\gamma'/\pi}{x_0^2 + \gamma'^2} (\pi\gamma^2)^{1/2} \sum_{m=1}^{n+1} \frac{(-Y/[\pi\gamma])^m \Gamma(m+3/2)}{m! (m+2)!} \quad (9.33)$$

und Wert

$$\hat{s} = \frac{\gamma'/\pi}{x_0^2 + \gamma'^2} (\pi\gamma^2)^{1/2} \left[\frac{\pi^{1/2}}{Y/[\pi\gamma]} \exp\left(-\frac{Y}{2\pi\gamma}\right) I_1\left(\frac{Y}{2\pi\gamma}\right) - \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(3)} \right] \quad (9.34)$$

zur unendlichen Reihe (9.11) asymptotisch verwandt ist, die Terme also gleiche Asymptotik für $m \rightarrow \infty$ haben. Hier ist I_1 die modifizierte Bessel-Funktion erster Art der Ordnung 1.

Tabelle 9.1: Beschleunigung der Taylor-Reihe (9.11) mit den t - und k -Levin-Transformationen für $G_2(5, 50, 1, 1)$

n	$\mathcal{L}_n^{(0)}(1, s_n, {}^t\omega_n)$	$\mathcal{L}_n^{(0)}(1, s_n, {}^k\omega_n)$	$\mathcal{L}_n^{(0)}(1, s'_n, \Delta s'_{n-1})$
9	-0.10912	-0.1091009	-0.109105
10	-0.10909	-0.10910079	-0.1090998
11	-0.109102	-0.109100811	-0.1091011
12	-0.1091004	-0.1091008085	-0.10910075
13	-0.10910089	-0.1091008096	-0.10910082
14	-0.109100791	-0.10910080934	-0.109100807
15	-0.109100813	-0.10910080939	-0.1091008098
16	-0.1091008088	-0.109100809378	-0.10910080931
17	-0.10910080948	-0.1091008093794	-0.10910080939
18	-0.10910080936	-0.1091008093792	-0.109100809378
19	-0.109100809381	-0.1091008093792	-0.1091008093794
20	-0.1091008093789	-0.1091008093792	-0.1091008093791
21	-0.1091008093792	-0.1091008093792	-0.1091008093792
∞	-0.1091008093792	-0.1091008093792	-0.1091008093792

Man kann daher die Kummer-Transformation (4.6) verwenden, die zu einer transformierten Folge s'_n führt. Damit wird es im Zusammenhang mit Levin-artigen Transformationen auch möglich, die in Gleichung (4.13) definierte k -Variante der Restabschätzungen ${}^k\omega_n$ zu verwenden.

In Tabelle 9.1 vergleichen wir die t - und die k -Variante der Levin-Transformation für die Reihe (9.11) mit Partialsummen

$$s_n = \sum_{m=1}^{n+1} \frac{(-Y)^m}{m!(2m+\nu+1)} S_m(x_0, \gamma, \gamma') \quad (9.35)$$

mit der t -Variante der Levin-Transformation für die Kummer-transformierte Reihe s'_n (unter Verwendung der Folge (9.33)). Zum Vergleich seien die Werte $s_{20} = -14.94$, $s_{40} = -0.109107$, $s'_{20} = -1.111$ und $s'_{40} = -0.1091010$ genannt. Das heißt, daß die Reihe (9.11) selbst in diesem Fall recht langsam konvergiert. Dies ist eine Folge des großen Wertes von $Y/\gamma = 50$. Die (einmal angewandte) Kummer-Transformation führt zu einer leichten Konvergenzverbesserung. Es ist wichtig, daß die *nichtlineare* t -Variante der Levin-Transformation etwas weniger effektiv ist als die *lineare* k -Variante der Levin-Transformation, wenn beide auf s_n angewandt werden. Die t -Variante der Levin-Transformation liefert bei Anwendung auf s'_n Resultate, deren Qualität zwischen diesen beiden Varianten liegt.

Die Werte in Tabelle 9.1 wurden auf einer SUN-Workstation in FORTRAN DOUBLE PRECISION berechnet, was einer Maschinengenauigkeit von etwa 14 Stellen entspricht. Aufgrund des alternierenden Charakters der Reihe sind die Extrapolationsverfahren numerisch stabil und es ist nicht nötig, die Rechnung auch in höherer Genauigkeit durchzuführen.

Je größer Y/γ wird, desto schwieriger ist die Extrapolation, wenn man die Taylor-Reihe (9.11) verwendet.

Tabelle 9.2: Anwendung der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation auf die Taylorreihe (9.11) für $G_2(5, 100, 1, 1)$

n	Terme	Partialsommen	${}_2\mathbf{J}$	EPSEST
10	91861.213	66895.77374	-0.16361295063	1.01D-04
11	-232167.580	-165271.80699	-0.16362184363	1.25D-05
12	544003.140	378731.33315	-0.16361978724	2.83D-06
13	-1187930.521	-809199.18837	-0.16361796896	2.45D-06
14	2428559.463	1619360.27522	-0.16361740143	7.52D-07
15	-4666794.652	-3047434.37688	-0.16361728387	1.53D-07
16	8459580.437	5412146.06089	-0.16361728080	3.94D-09
17	-14511801.324	-9099655.26392	-0.16361728543	5.87D-09
18	23625300.694	14525645.43036	-0.16361728779	2.96D-09
19	-36596300.470	-22070655.03969	-0.16361728842	7.84D-10
20	54065082.816	31994427.77722	-0.16361728885	5.29D-10
21	-76338198.462	-44343770.68529	-0.16361728946	7.39D-10
22	103218778.805	58875008.11990	-0.16361729032	1.04D-09
∞		-0.16361728818	-0.16361728818	

EPSEST: Programmintern geschätzter Fehler

In Tabelle 9.2 wird der Fall $G_2(5, 100, 1, 1)$ behandelt. Dargestellt sind die Terme und Partialsommen der Taylor-Reihe (9.11) sowie die entsprechenden Transformierten ${}_2\mathbf{J}_0^{(n)}(1, s_n, {}^k\omega_n)$, also die k -Variante der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation. Vergleichswerte wurden mit

Tabelle 9.3: Anwendung der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation auf die Taylorreihe (9.11) für $G_0(5, 100, 1, 1)$

n	Terme	Partialsommen	${}_2\mathbf{J}$	EPSEST
10	100609.900	73091.78105	-0.30690881936	1.47D-04
11	-252356.066	-179264.28496	-0.30692577549	2.39D-05
12	587523.391	408259.10639	-0.30692503925	1.01D-06
13	-1275925.374	-867666.26858	-0.30692311318	2.60D-06
14	2596046.323	1728380.05458	-0.30692243837	8.95D-07
15	-4967878.178	-3239498.12347	-0.30692227548	2.12D-07
16	8972282.282	5732784.15902	-0.30692226456	1.40D-08
17	-15341047.114	-9608262.95579	-0.30692226792	4.27D-09
18	24902343.975	15294081.01926	-0.30692227050	3.23D-09
19	-38473033.827	-23178952.80822	-0.30692227121	8.88D-10
20	56702403.929	33523451.12171	-0.30692227170	5.94D-10
21	-79888812.344	-46365361.22277	-0.30692227236	8.02D-10
22	107806280.085	61440918.86265	-0.30692227334	1.19D-09
∞		-0.30692227095	-0.30692227095	

EPSEST: Programmintern geschätzter Fehler

automatischer Quadratur bestimmt. Man erkennt deutlich, wie die Terme der Taylor-Reihe ähnlich denen einer alternierenden, divergenten Reihe anwachsen. Trotzdem können aus diesen Termen die ersten neun Stellen des exakten Ergebnisses gewonnen werden.

In Tabelle 9.3 wird analog der Fall $G_0(5, 100, 1, 1)$ behandelt. Auch in diesem Fall ist die k -Variante der ${}_2\mathbf{J}$ -Transformation in der Lage, neun exakte Stellen zu reproduzieren.

Für größere Werte von Y kann man erfolgreich die asymptotischen Darstellungen (9.30) und (9.31) verwenden. Auch diese Entwicklungen kann man noch beschleunigen, was in Tabelle 9.4 für den Fall der Transformation mit der ${}_2\mathbf{U}$ -Transformation für $G_2(0, 200, 1, 1)$ dargestellt ist.

Für größere Y konvergieren die asymptotischen Entwicklungen sehr schnell.

In den Abbildungen 9.1-9.5 ist gezeigt, welche Linienformen man auf der Grundlage des Modelles von Drescher und Dick im Falle resonanter Löcher erwartet. Betrachtet wird ein Beispiel mit $\Gamma_{ab} = \Gamma_{ac} = 1$, $f_{ac} = f_{ab} = 0.4$, $\Phi = 0.001$, $F_B = 10^{12}$, $\sigma_{ab}^0 = \sigma_{ac}^0 = 10^{-3}$, wobei auf die Angabe von Einheiten aufgrund der Skalenrelation (9.8) verzichtet werden kann. Verschiedene Brenndauern führen zu unterschiedlich großen Werten des Parameters Y . Große Y entsprechen großen Brenndauern und damit tiefen Löchern.

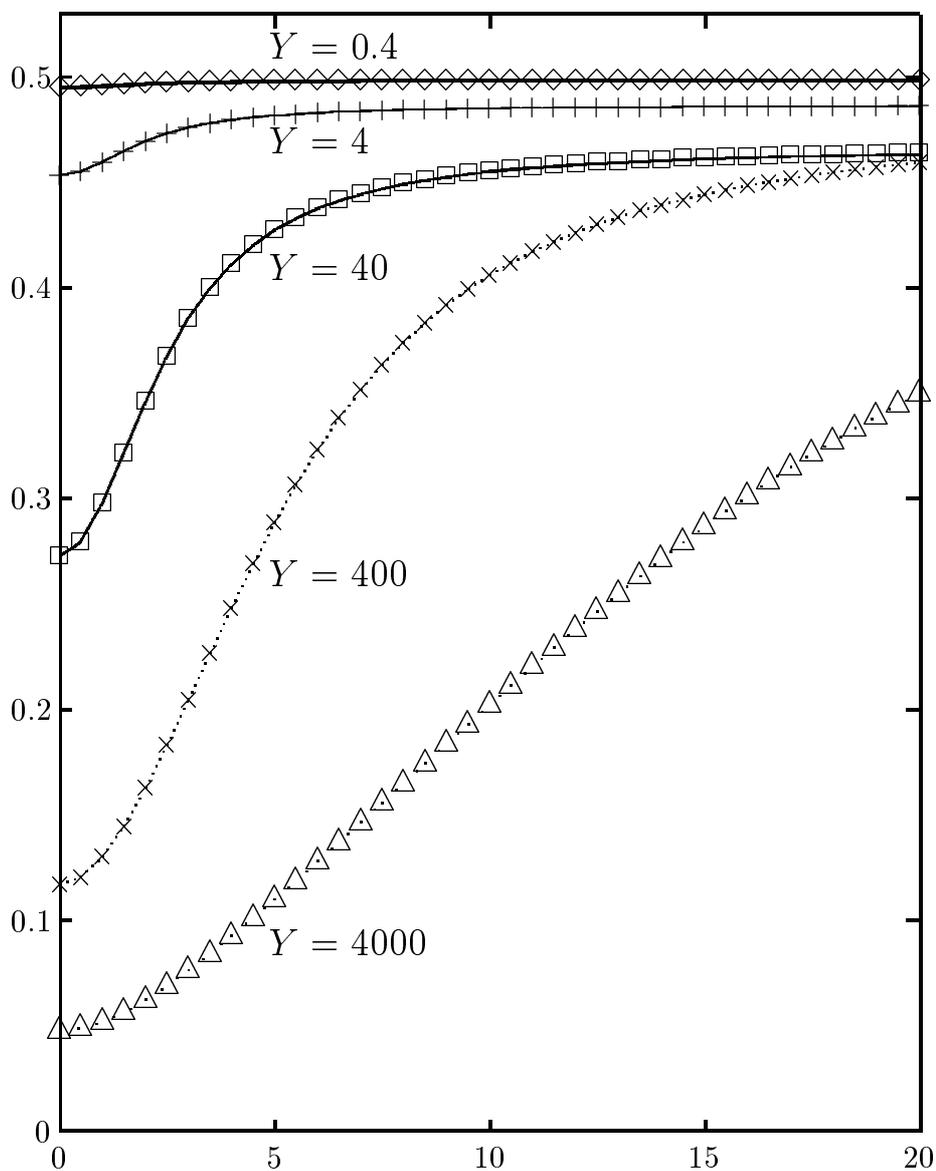
Dargestellt sind der Polarisationsgrad ρ , das Parallelsignal $-H_{\parallel}$ (das Loch wird damit zum Berg) und das Differenzsignal $H_{\parallel} - H_{\perp}$ als Funktion von x_0 , wobei jeweils nur die Ergebnisse für $x_0 > 0$ aufgetragen sind, da es sich in allen drei Fällen um gerade

Tabelle 9.4: Anwendung der ${}_2\mathbf{U}$ -Transformation auf die asymptotische Entwicklung für $G_2(0, 200, 1, 1)$

	Terme	Partialsummen	${}_2\mathbf{U}$	EPSEST
1	3.54D-02	-0.29808836180288	-0.29808836180288	1.00D+60
2	7.36D-04	-0.29735274293361	-0.29732904490733	7.83D-04
3	-2.45D-06	-0.29735519644055	-0.29735514825717	-2.60D-05
4	-4.01D-08	-0.29735523658597	-0.29735523845227	-9.06D-08
5	-1.29D-09	-0.29735523787345	-0.29735523793200	5.24D-10
6	-6.14D-11	-0.29735523793488	-0.29735523793921	-7.28D-12
7	-3.89D-12	-0.29735523793877	-0.29735523793911	1.04D-13
8	-3.07D-13	-0.29735523793907	-0.29735523793911	-2.66D-15
9	-2.91D-14	-0.29735523793910	-0.29735523793911	1.11D-16
10	-3.21D-15	-0.29735523793911	-0.29735523793911	1.11D-16
∞		-0.29735523793909	-0.29735523793909	

EPSEST: Programmintern geschätzter Fehler

Funktionen von x_0 handelt, sowie der Polarisationsgrad ρ als Funktion der parallelen und vertikalen Lochfunktionen H_{\parallel} und H_{\perp} . Man beachte, daß das Differenzsignal als Funktion von x_0 für größere Y zwei zu $x_0 = 0$ symmetrische Maxima aufweist, wie sie auch im Experiment gesehen werden. Dies sollte eine spezifischere Auswertung erlauben als im Falle des Polarisationsgrades, bei der diese charakteristischen Doppelmaxima nicht auftreten. Außerdem sei bemerkt, daß man den Debye-Waller-Faktor f_{ab} in den Abbildungen insofern wiederfindet, als für sehr lange Brenndauern die Lochtiefe sich ihm asymptotisch annähert.

Abbildung 9.1: Polarisationsgrad ρ als Funktion von $x_0 > 0$

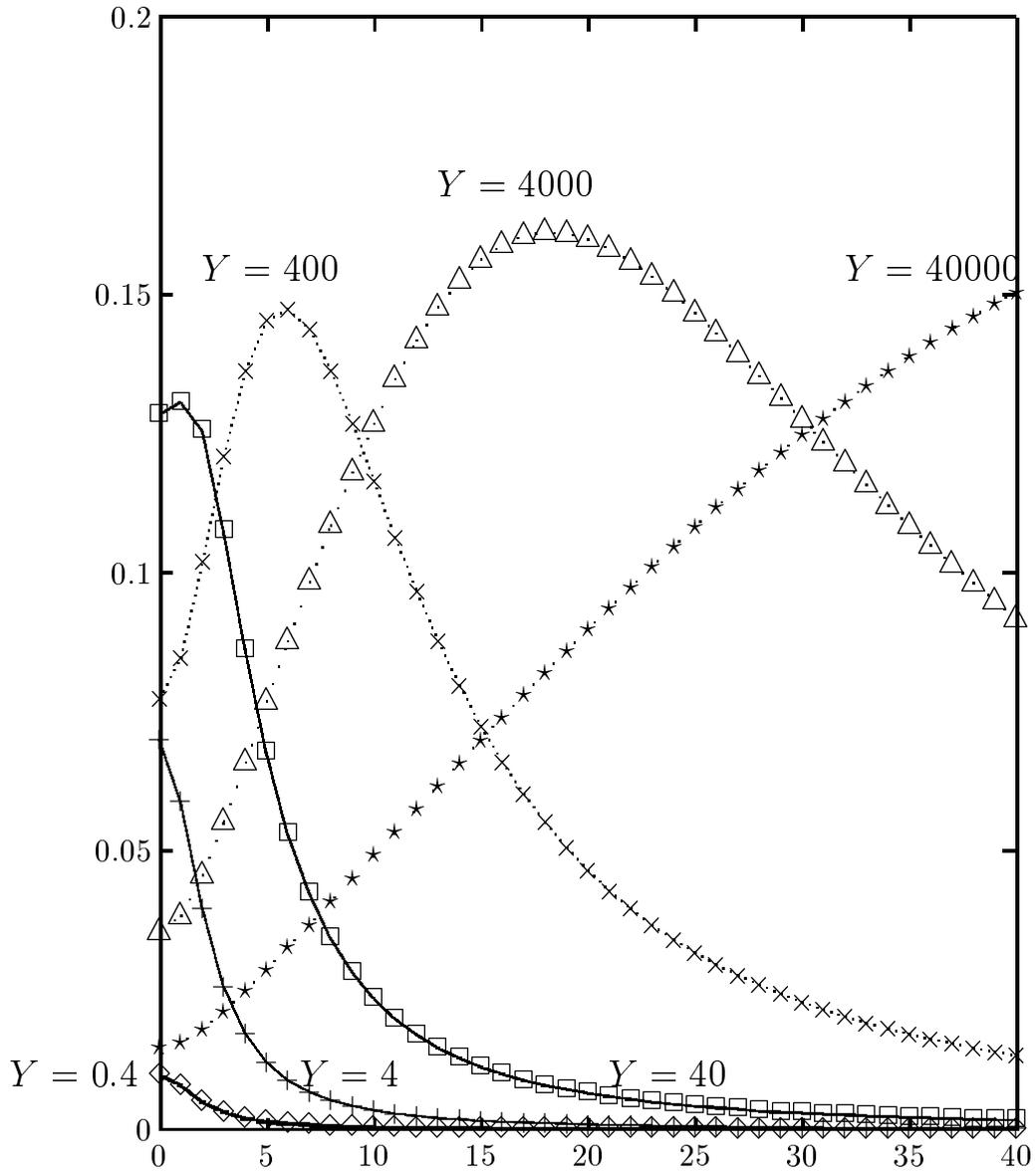
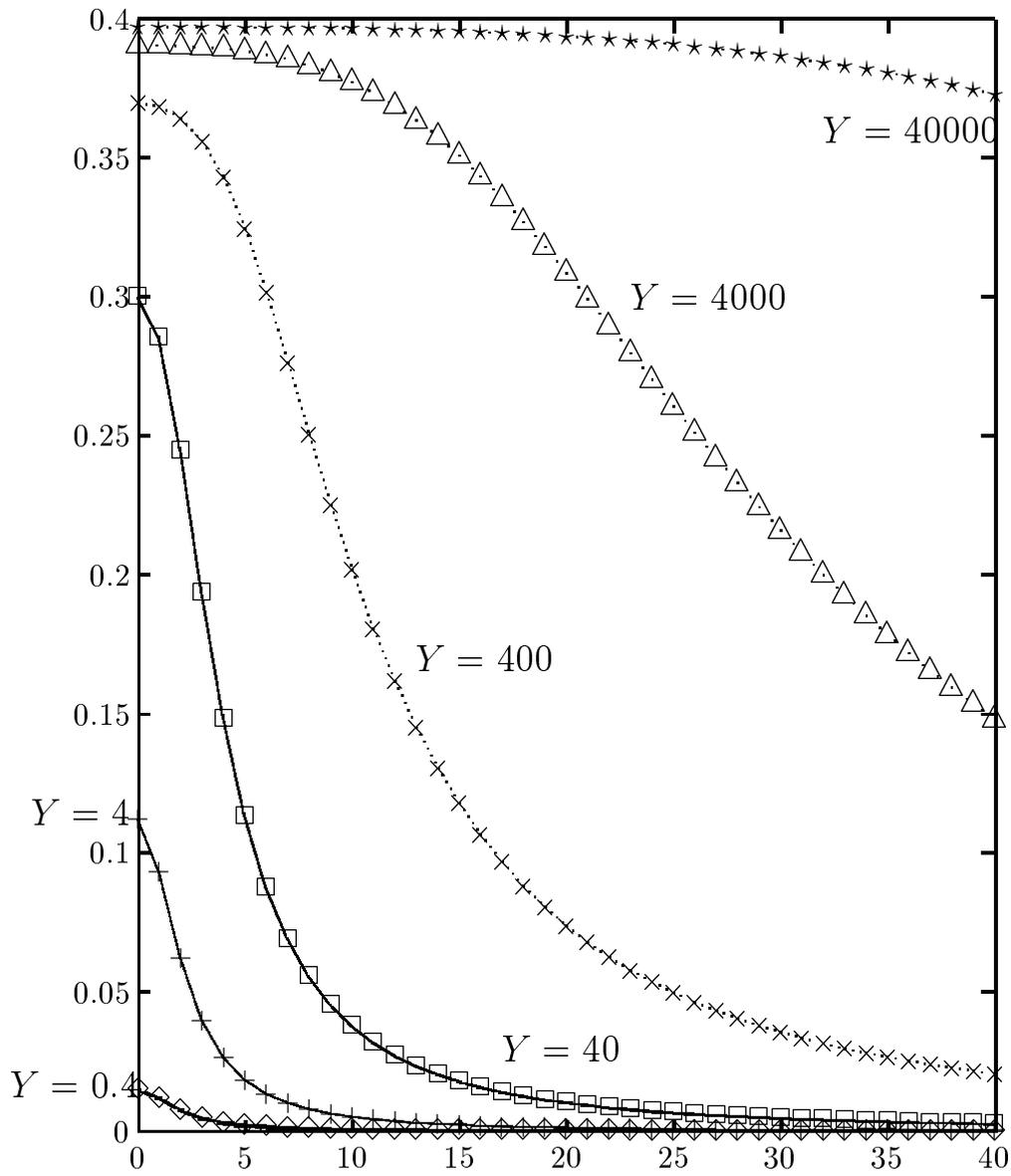
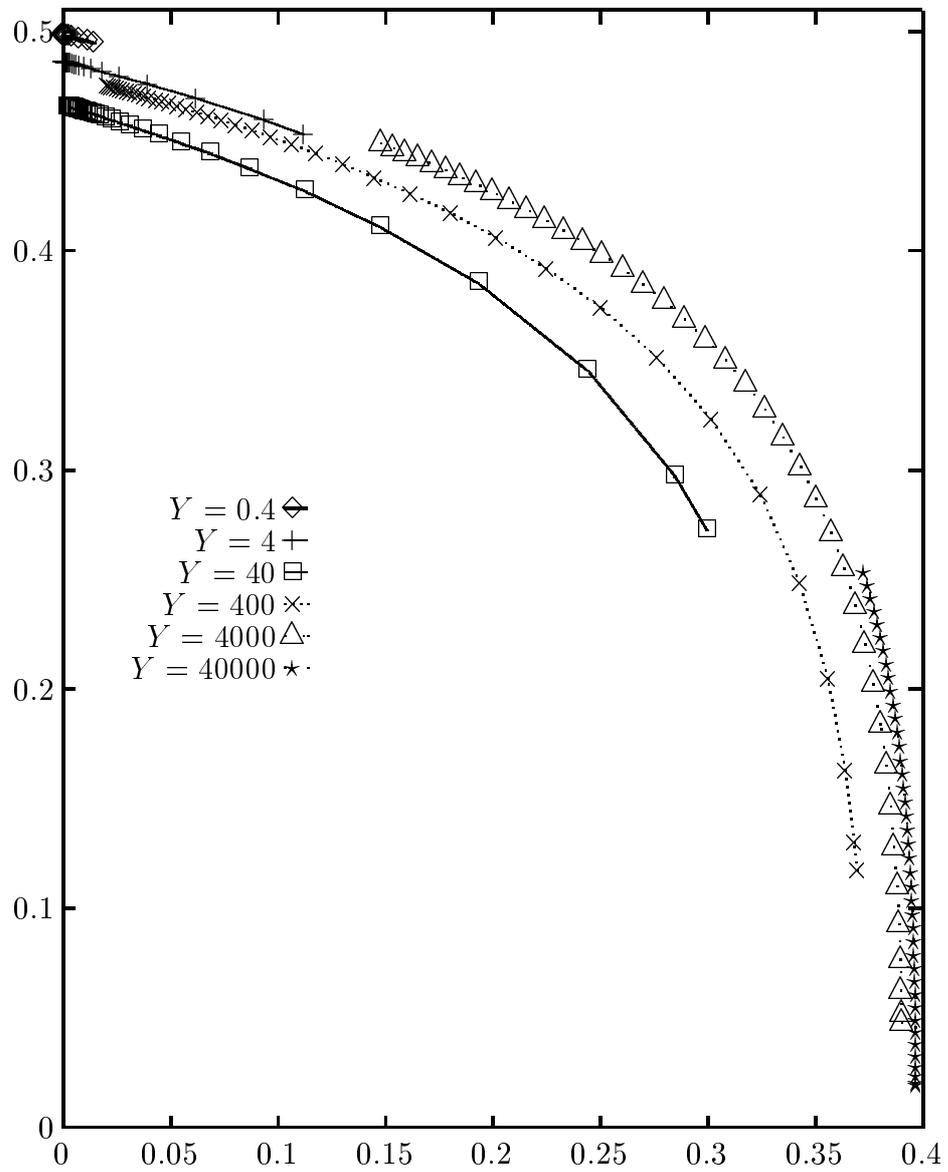
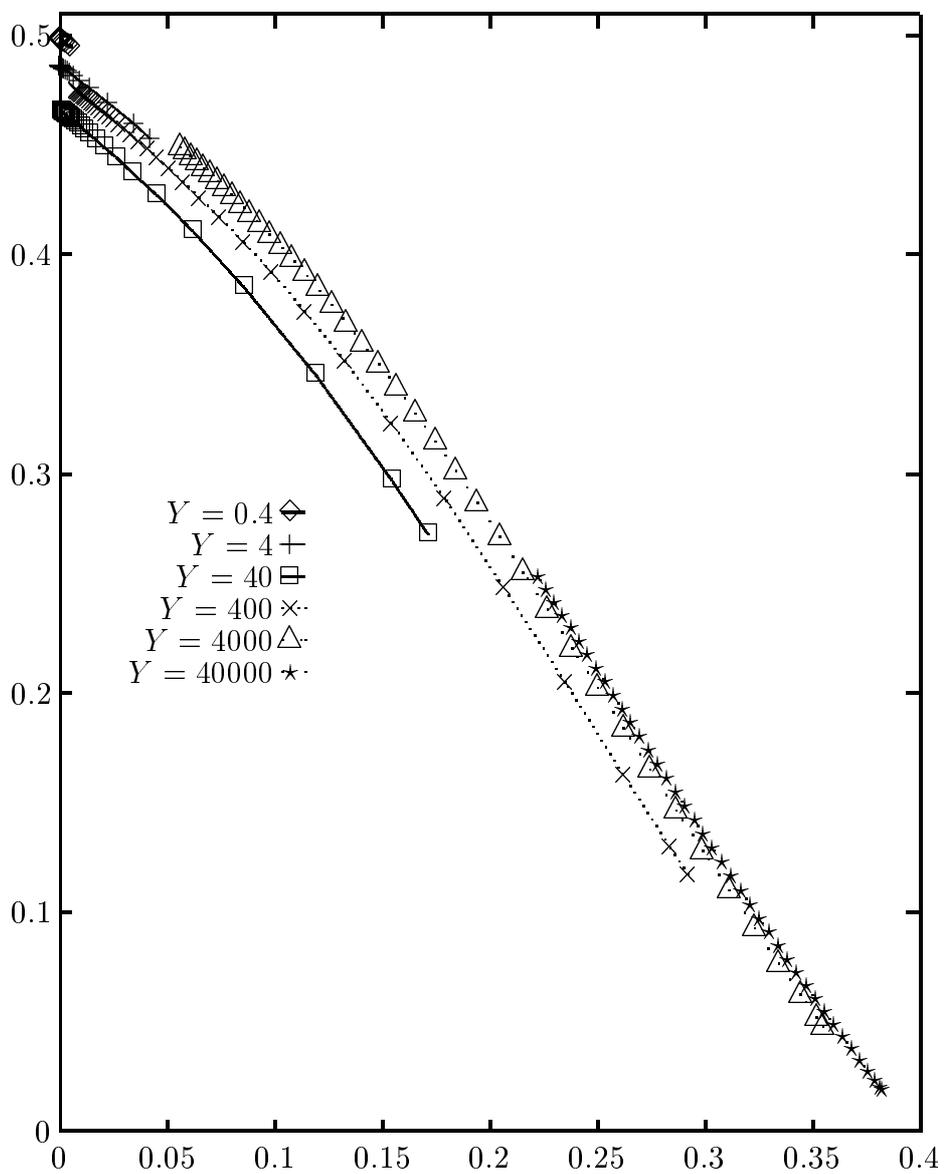


Abbildung 9.2: Differenzsignal $H_{\parallel} - H_{\perp}$ als Funktion von $x_0 > 0$

Abbildung 9.3: Parallelsignal H_{\parallel} als Funktion von $x_0 > 0$

Abbildung 9.4: Polarisationsgrad ρ als Funktion des Parallelsignals H_{\parallel}

Abbildung 9.5: Polarisationsgrad ρ als Funktion von H_{\perp}

9.3.1 Resonante Löcher in TPP

Die auf den Extrapolationsverfahren basierenden Programme wurden von Decker [87] genutzt, um Spektren resonanter Löcher mit wenigen Parametern anzupassen, die experimentelle Bedeutung haben. Das untersuchte System war Tetraphenylporphyrin (TPP) in einer Plexiglasmatrix. Für Details der Meßmethodik sei auf die Literatur verwiesen. [88]

Da bei solchen Anpassungen sehr viele Faltungsintegrale ausgerechnet werden müssen, handelt es sich dabei um rechenintensive Anwendungen. Während die auf automatischer Quadratur basierenden Programme auf Silicon Graphics Workstations Rechenzeiten der Größenordnung $O(1 \text{ Tag})$ benötigten, konnten durch die Verwendung der Extrapolationsverfahren die Rechenzeiten auf die Größenordnung $O(1 \text{ Stunde})$ reduziert werden.

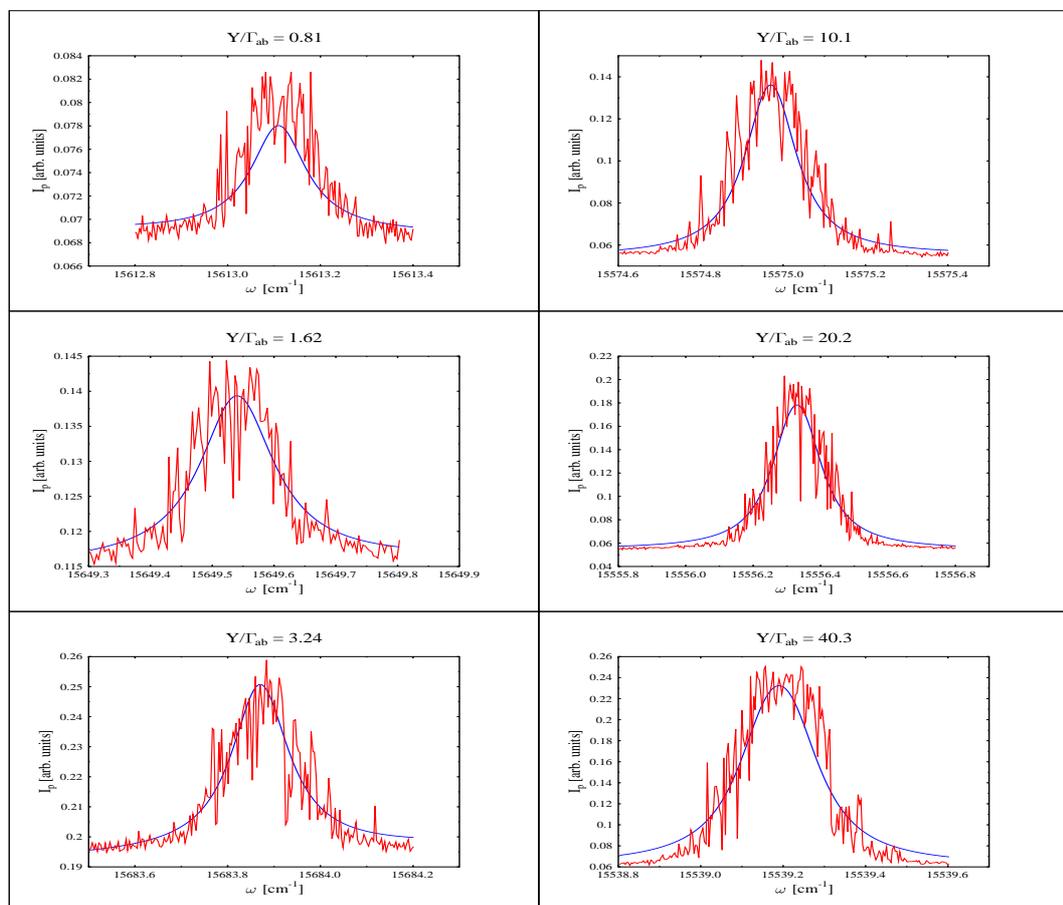


Abbildung 9.6: Dreiparametrischer Fit von resonanten Löchern an TPP: Parallelsignal für 6 verschiedene Tiefen Y

Als Beispielergebnis sei hier der Least-Square-Fit von insgesamt 12 Lochspektren (je ein Spektrum für parallele Polarisation und ein Spektrum des Differenzsignals für 6 ver-

schiedene Brenndauern) mit nur drei Parametern angeführt. Die optimierten Parameter waren der Debye–Waller–Faktor f_{ab} , die Linienbreite Γ_{ab} die allerdings von der gleichen Größenordnung wie die Linienbreite des verwendeten Lasers war, sowie als dritter Parameter $y = Y/\Gamma_{ab}/f_{ab}/t$.

Das Ergebnis der Anpassung ist in den Abbildungen 9.6 und 9.7 dargestellt. Aufgetragen ist jeweils das Signal (das “negative Loch”). Man erkennt einen befriedigenden, wenn auch nicht sehr guten Fit, der in den Flanken systematische Fehler aufzuweisen scheint. Es stellte sich durch diese Untersuchung heraus, daß man weitere Experimente durchführen muß, um das Modell von Drescher und Dick [103] zu testen, bei denen seine wesentlichen Annahmen, daß die Lochspektren an optische dünnen Proben mit einem sehr scharfbandigen Laser gewonnen wurden, besser erfüllt sind.

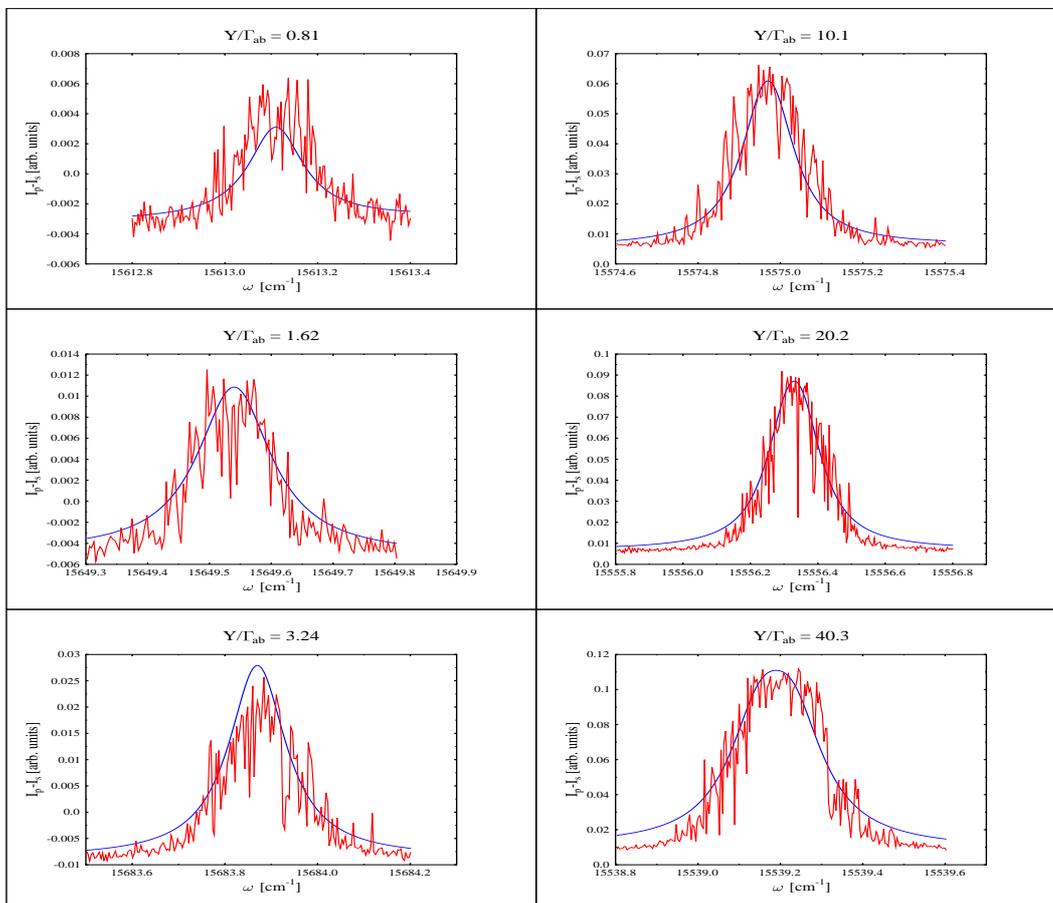


Abbildung 9.7: Dreiparametrischer Fit von resonanten Löchern an TPP: Differenzsignal für 6 verschiedene Tiefen Y

Kapitel 10

Extrapolation von Multipolentwicklungen

In diesem Kapitel wird die Anwendung der in Kapitel 5 beschriebenen Methoden auf Orthogonalentwicklungen beschrieben, insbesondere auf Entwicklungen nach Legendre-Polynomen.

Multipolentwicklungen bzw. Entwicklungen nach Kugelflächenfunktionen stellen solche Orthogonalentwicklungen dar und spielen eine große Rolle in den Naturwissenschaften. Daher gibt es eine immense Literatur zu diesem Gebiet. In der Chemie spielen solche Entwicklungen beispielsweise eine Rolle

- bei Übergängen zwischen Molekülzuständen bei der Wechselwirkung mit elektromagnetischer Strahlung, im Rahmen der zeitabhängigen Störungstheorie, (vgl. z.B. [310, Kap. 16]),
- bei der Beschreibung von NMR-Experimenten (*Nuclear Magnetic Resonance*) [99],
- bei der Beschreibung der intermolekularen Wechselwirkungen, die fundamental in die klassische Beschreibung von Vielteilchensystemen eingeht, wobei auch induzierte Multipolmomente eine Rolle spielen (z.B. Polarisierbarkeit), [214, Kap. 15]
- insbesondere bei der Berechnung des elektrostatischen Potentials von molekularen Ladungsverteilungen, z.B. durch Lösung der Poisson-Gleichung [211], mit Anwendungen in Dichtefunktionalprogrammen (deMon),
- zur Charakterisierung von Molekülen durch Angabe der elektrostatischen Multipolmomente (Dipol-, Quadrupol-, Oktupol- und Hexadecapolmomente), wobei das erste nichtverschwindende Multipolmoment unabhängig von der Wahl des Entwicklungszentrums ist [67], das meist in den Massenschwerpunkt des Moleküls gelegt wird,
- zur Bestimmung von effektiven Atomladungen (Partialladungen) [344, 391] für Kraftfeld- bzw. *Molecular-Mechanics*- und *Molecular-Modeling*-Rechnungen durch Anpassung an das elektrostatische Potential eines Moleküls [28, 39, 83, 100, 236, 293, 397]

als Alternative zur Ladungsbestimmung aufgrund von Populationsanalysen [13, 243, 244, 245] oder auch zu empirischen Ladungen auf der Grundlage von Wechselwirkungsenergien und Abständen (CHARMm, [255, 256]) oder Flüssigkeitseigenschaften [69, 86, 85, 106, 199, 200, 201, 202],

- bei der Bestimmung von effektiven atomaren Multipolmomenten, ebenfalls für molekulare Kraftfeldrechnungen, bei denen die effektiven Kräfte zwischen zwei Molekülen als Summe von elektrostatische Wechselwirkungen dieser verteilten atomaren Multipolmomente von je zwei Atomen dargestellt werden [332, 343] ,
- in der *Fast Multipole Method* (FMM) von Greengard und Rokhlin [70, 142, 143, 144, 296, 282, 281, 364, 390], deren Rechenaufwand — wie bei einigen anderen Methoden auch, siehe den nächsten Punkt — *linear* mit der Zahl der Atome skaliert und die sowohl derzeit für Moleküldynamikrechnungen an Makromolekülen unter voller Berücksichtigung langreichweitiger Coulomb-Wechselwirkungen verwendet wird, [35, 395, 396, 403] als auch in das neue Quantenchemieprogramm Q-Chem von Johnson, Gill und Head-Gordon einfließen soll ¹,
- im *Distributed Parallel Multipole Tree Algorithm* (DPMTA), dessen Rechenaufwand ebenfalls linear mit der Systemgröße skaliert und der ebenfalls schon in Programme für Moleküldynamiksimulationen an Makromolekülen Eingang gefunden hat ²,
- in Tight-Binding Hartree-Fock-Rechnungen an Polymeren [90],
- bei der Berechnung von Molekülintegralen (meist von exponentialartigen Basisfunktionen), vor allem wenn Additionstheoreme und/oder einzentrige Entwicklungen eingesetzt werden [18, 19, 32, 36, 37, 38, 112, 114, 115, 117, 119, 130, 145, 147, 148, 158, 171, 172, 173, 174, 175, 177, 178, 188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197, 205, 230, 238, 265, 266, 278, 280, 285, 290, 300, 301, 311, 333, 334, 335, 336, 337, 339, 340, 350, 351, 352, 353, 357, 359, 365, 367, 379, 380, 383, 382, 381, 384, 385, 386].

Wir untersuchen im folgenden die Konvergenzbeschleunigung einer einzentrigen Multipolentwicklung im Vergleich zur Entwicklung des exakten elektrostatischen Potentials in Kugelflächenfunktionen.

Eine Ausdehnung der Resultate auf die Konvergenzbeschleunigung von verteilten Multipolentwicklungen, bei denen das elektrostatische Potential durch eine Summe von abgebrochenen Multipolentwicklungen an einzelnen Zentren — meist den Atomen — dargestellt wird, kann man einfach erhalten, indem man die Entwicklungen bezüglich der jeweiligen Zentren einzeln beschleunigt und die erhaltenen Approximationen aufsummiert.

¹Laut einer E-mail Nachricht von W. Koch [kochw@argon.chem.TU-Berlin.DE, Message-Id: <9505170906.AA28372@argon.chem.TU-Berlin.DE> vom 17. 5. 1995] in der *Computational Chemistry List*.

²Programm namd, University of Illinois, <http://www.ks.uiuc.edu:1250/Research/namd/>.

10.1 Multipolentwicklung des elektrostatischen Potentials

Zur Berechnung des elektrostatischen Potentials U einer Ladungsverteilung ρ kann man die Formel (in atomaren Einheiten)

$$U(\vec{r}) = \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (10.1)$$

verwenden. Setzt man hier die Laplace-Entwicklung

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_{\ell}^m(\vec{r}/r) Y_{\ell}^{m*}(\vec{r}'/r')}{2\ell + 1} \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} \quad (10.2)$$

ein, wobei die Bezeichnungen $r = |\vec{r}|$, $r' = |\vec{r}'|$, $r_{<} = \min(r, r')$ und $r_{>} = \max(r, r')$ verwendet werden und Y_{ℓ}^m die komplexen Kugelflächenfunktionen in der Phasenkonvention von Condon und Shortley [81] sind (siehe auch Gl. (A.31)), so folgt bei Vertauschung von Integration und Summation

$$U(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_{\ell}^m(\vec{r}/r)}{2\ell + 1} \int \rho(\vec{r}') \frac{r_{<}^{\ell}}{r_{>}^{\ell+1}} Y_{\ell}^{m*}(\vec{r}'/r') d^3 r'. \quad (10.3)$$

Dies kann man auch als Orthogonalentwicklung nach dem vollständigen, orthonormierten System der Kugelflächenfunktionen interpretieren.

Ist die Ladungsverteilung außerhalb einer Kugel um den Ursprung mit Radius a gleich Null und gilt $r > a$, so gilt immer $r > r'$ für alle \vec{r}' , für die $\rho(\vec{r}') \neq 0$ ist, und es folgt

$$U(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} r^{-\ell-1} \frac{Y_{\ell}^m(\vec{r}/r)}{2\ell + 1} \int \rho(\vec{r}') r'^{\ell} Y_{\ell}^{m*}(\vec{r}'/r') d^3 r'. \quad (10.4)$$

Führt man die Multipolmomente

$$Q_{\ell}^m = \int r'^{\ell} Y_{\ell}^m(\vec{r}'/r') \rho(\vec{r}') d^3 r' \quad (10.5)$$

ein, so kann man das Potential durch eine unendliche Reihe der Form

$$U(\vec{r}) = U_Q(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{1}{r^{\ell+1}} \frac{Y_{\ell}^m(\vec{r}/r)}{2\ell + 1} Q_{\ell}^{m*} \quad (10.6)$$

berechnen, die auch als Multipolentwicklung bezeichnet wird. Ist insbesondere die Ladungsverteilung $\rho(\vec{r})$ rotationssymmetrisch um eine Achse \vec{R} , so haben die Multipolmomente die Form

$$Q_{\ell}^{m*} = Y_{\ell}^{m*}(\vec{R}/R) q_{\ell}, \quad (10.7)$$

und man erhält unter Verwendung des Additionstheorems der Kugelflächenfunktionen

$$\frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_m Y_\ell^m(\vec{r}/r) Y_\ell^{m*}(\vec{R}/R) = P_\ell \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{R}}{rR} \right) \quad (10.8)$$

eine Entwicklung nach Legendre-Polynomen P_ℓ

$$U_Q(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{R}}{rR} \right) \frac{q_\ell}{r^{\ell+1}}. \quad (10.9)$$

Daß das elektrostatische Potential diese Form hat, folgt auch aus der Tatsache, daß die Laplace-Gleichung $\nabla^2 U = 0$ im Außenraum einer Ladungsverteilung erfüllt sein muß, wobei die Lösungen für $r \rightarrow \infty$ in Kugelkoordinaten nur Linearkombinationen der irregulären Kugelfunktionen $\mathcal{Z}_\ell^m(\vec{r}) = r^{-\ell-1} Y_\ell^m(\vec{r}/r)$ sein können, so daß, wenn man die Rotations-symmetrie um die Richtung \vec{R}/R beachtet, nur Linearkombinationen von $r^{-\ell-1} P_\ell(\cos \alpha)$ in Frage kommen, wobei α der Winkel zwischen dem Ortsvektor und der Richtung \vec{R}/R ist.

Ist die Ladungsverteilung nicht auf eine kompakte Teilmenge des \mathbb{R}^3 beschränkt, so gelten die obigen Multipolentwicklungen nur noch näherungsweise für große $r = |\vec{r}|$. Denn dann gilt *nicht* immer $r > r'$ für alle \vec{r}' , für die $\rho(\vec{r}') \neq 0$ ist.

Die Differenz zwischen dem wahren Potential U und der Multipolentwicklung U_Q aus Gl. (10.6) ist

$$U(\vec{r}) - U_Q(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_\ell^m(\vec{r}/r)}{2\ell+1} \int \rho(\vec{r}') \left\{ \frac{r_\leq^\ell}{r_\leq^{\ell+1}} - \frac{r'^\ell}{r^{\ell+1}} \right\} Y_\ell^{m*}(\vec{r}'/r') d^3 r'. \quad (10.10)$$

Wegen

$$\frac{r_\leq^\ell}{r_\leq^{\ell+1}} - \frac{r'^\ell}{r^{\ell+1}} = 0 \quad \text{für } r' \leq r \quad (10.11)$$

kann man die Differenz $U - U_Q$ auch über

$$U(\vec{r}) - U_Q(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_\ell^m(\vec{r}/r)}{2\ell+1} \int_{r'>r} \rho(\vec{r}') \left\{ \frac{r^\ell}{r'^{\ell+1}} - \frac{r'^\ell}{r^{\ell+1}} \right\} Y_\ell^{m*}(\vec{r}'/r') d^3 r' \quad (10.12)$$

ausdrücken. Fällt $\rho(\vec{r}')$ für große Argumente genügend schnell, so werden demnach die Beiträge mit gegebener Drehimpulsquantenzahl ℓ zur Differenz $U - U_Q$ für große r gegen Null gehen, wenn sie nicht aufgrund der Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen sowieso verschwinden. Gilt zum Beispiel $\rho(\vec{r}') = \exp(-\gamma r')$ für $\gamma > 0$, so trägt aufgrund der Winkelintegration nur der Term mit $\ell = 0$ bei und man erhält

$$U(\vec{r}) - U_Q(\vec{r}) = 4\pi \int_r^\infty \exp(-\gamma r') \left\{ \frac{1}{r'} - \frac{1}{r} \right\} r'^2 d r' = -4\pi \frac{\exp(-\gamma r) (2 + \gamma r)}{r \gamma^3}. \quad (10.13)$$

In diesem einfachen Modellbeispiel verschwindet also auch die Differenz für große r exponentiell.

Wir bemerken, daß die Multipolentwicklung U_Q für $\vec{r} \neq 0$ eine Lösung der Laplace-Gleichung $\nabla^2 U_Q = 0$ ist. Das exakte elektrostatische Potential U erfüllt jedoch die Poisson-Gleichung (atomare Einheiten)

$$\nabla^2 U(\vec{r}) = -4\pi\rho(\vec{r}) . \quad (10.14)$$

Daraus erhellt, daß auch die Differenz $U - U_Q$ der Poisson-Gleichung genügt. Außerdem ergibt sich, daß nur dort die Multipolentwicklung eine gute Näherung für U darstellen kann, wo die Ladungsdichte klein ist, mithin für große Abstände.

Die Multipolentwicklung bietet den Vorteil, daß man die Momente Q_ℓ^m bzw. q_ℓ zu einer gegebenen Ladungsverteilung ρ nur einmal ausrechnen muß und dann die Multipolnäherung $U_Q(\vec{r})$ für $U(\vec{r})$ sehr einfach für sehr viele, beliebige Aufpunkte \vec{r} berechnen kann. Die exakte Entwicklung (10.3) für $U(\vec{r})$ dagegen ist numerisch aufwendiger auszuwerten. Sie erfordert die Berechnung der Integrale

$$\tilde{Z}_\ell^m(r) = \int \rho(\vec{r}') \frac{r_{<}^\ell}{r_{>^{\ell+1}}} Y_\ell^m(\vec{r}'/r') d^3 r' , \quad (10.15)$$

die außerdem vom Abstand r des Aufpunkts vom Entwicklungszentrum abhängen. Im Falle, daß die Ladungsdichte ρ um die Richtung \vec{R} rotationssymmetrisch ist, gilt in Analogie zu Gl. (10.7) die Beziehung

$$\tilde{Z}_\ell^m(r) = Y_\ell^m(\vec{R}/R) \tilde{z}_\ell(r) , \quad (10.16)$$

womit sich die Entwicklung (10.3) zu

$$U(\vec{r}) = 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_\ell^m(\vec{r}/r)}{2\ell + 1} Y_\ell^{m*}(\vec{R}/R) \tilde{z}_\ell(r) = \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{R}}{r R} \right) \tilde{z}_\ell(r) \quad (10.17)$$

vereinfacht. Dies entspricht der Zylindersymmetrie des Problems, da nur noch die Koordinaten r und θ mit $rR \cos \theta = \vec{r} \cdot \vec{R}$ eingehen.

10.2 Dreizentriges Kernanziehungsgesetz

Im Rahmen eines LCAO-Verfahrens (*Linear Combination of Atomic Orbitals*) treten bei der Berechnung der Matrixelemente des molekularen Hamilton-Operators Integrale der Form

$$I[\phi_j, \phi_k](\vec{r}) = \int \frac{\phi_j^*(\vec{r}') \phi_k(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3 r' \quad (10.18)$$

auf. Hier sind $\phi_j(\vec{r})$ und $\phi_k(\vec{r})$ zwei je an einem Atom zentrierte, räumliche Orbitale, also Funktionen $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$, die sogenannten *Atomorbitale*, im folgenden auch Basisfunktionen genannt, und die (räumlichen) Molekülorbitale $\psi_\alpha(\vec{r})$ sind Linearkombinationen der Form

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = \sum_j c_{j,\alpha} \phi_j(\vec{r}) . \quad (10.19)$$

Ist das Atomorbital $\phi_j(\vec{r})$ am Punkt \vec{R}_j zentriert, so kann man es als

$$\phi_j(\vec{r}) = \chi_j(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (10.20)$$

schreiben, wobei die $\chi_j(\vec{r}) = \rho_j(r)\sigma_j(\theta, \phi)$ bei den in der Quantenchemie üblichen Basisfunktionen in einen Radial- und einen Winkelanteil faktorisieren. Bei den kartesischen Basisfunktionen ist der Winkelanteil proportional zu Produkten der Form $x^a y^b z^c$, bei sphärischen Basisfunktionen wird er dagegen durch Kugelflächenfunktionen $Y_\ell^m(\theta, \phi)$ beschrieben. Der Radialteil hat die Form $P(r)\exp(-\alpha r^\tau)$, wobei P ein Polynom ist. Ist $\tau = 2$, so spricht man von Gauß-artigen, bei $\tau = 1$ dagegen von exponentialartigen Basisfunktionen. Die einfachsten Vertreter dieser beiden Klassen von Basisfunktionen sind einerseits die 1s-Gauß-Funktion

$$G(\alpha, \vec{r}) = \exp(-\alpha r^2) \quad (10.21)$$

und andererseits die 1s-Exponentialfunktion

$$e(\alpha, \vec{r}) = \exp(-\alpha r) . \quad (10.22)$$

Letztere ist, bis auf einen konstanten Faktor, der Spezialfall $n = 1, \ell = m = 0$ einerseits der populärsten exponentialartigen Basisfunktionen, der Slater-Orbitale [327],[121, Gl. (2.1)]

$$\chi_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = r^{n-1} \exp(-\alpha r) Y_\ell^m(\theta, \phi) , \quad (10.23)$$

andererseits aber auch der im Fourier-Raum wesentlich einfacheren B -Funktionen, die durch [121, Gl. (2.14)]

$$B_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = \frac{1}{2^{n+\ell}(n+\ell)!} \hat{k}_{n-1/2}(\alpha r) r^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (10.24)$$

definiert sind und somit tensorielle Verallgemeinerungen der reduzierten Bessel-Funktionen aus Gl. (3.220) darstellen.

Die Integrale I bezeichnet man als *Kernanziehungsintegrale*. Sie sind Beispiele der zu Anfang dieses Kapitels angesprochenen Molekülintegrale.

Es treten bei Kernanziehungsintegralen drei Zentren auf ($\vec{r}, \vec{R}_j, \vec{R}_k$ im Falle von $I[\phi_j, \phi_k](\vec{r})$), die allerdings auch zusammenfallen können. Die dann auftretenden ein- und zweizentrig Kernanziehungsintegrale sind in der Regel wesentlich einfacher zu berechnen als dreizentrig Kernanziehungsintegrale. Diese sind Thema dieses Abschnitts.

Je nach der Wahl der Atomorbitale ist die Berechnung der Kernanziehungsintegrale kompliziert oder einfach.

Im Falle von Gauß-artigen Basisfunktionen ist die Berechnung der Kernanziehungsintegrale relativ einfach, da man Produkte zweier Gauß-Funktionen an zwei Zentren leicht durch Gauß-Funktionen an einem einzelnen Zentrum darstellen kann. Dies hat nämlich zur Folge, daß man dreizentrig Kernanziehungsintegrale mit Gauß-Funktionen auf zweizentrig Kernanziehungsintegrale zurückführen kann.

Im Falle von exponentialartigen Basisfunktionen ist die Berechnung dreizentriger Kernanziehungsintegrale schon bedeutend schwieriger. Im Rahmen der Fourier-Transformationsmethode kann man im Falle von B -Funktionen eine zweidimensionale Integraldarstellung verwenden, die man dann mittels numerischer Quadratur auswerten kann [158, 171, 174]. Dabei gibt es allerdings für große Abstände der Zentren noch Probleme aufgrund oszillierender Beiträge im Integranden, die letztlich die erzielbare Genauigkeit begrenzen. Es besteht also noch ein Bedarf an Methoden für große Abstände. Eine Alternative ist dabei die Verwendung von Entwicklungen nach Kugelflächenfunktionen bzw. Multipolentwicklungen.

Die Idee ist dabei relativ einfach:

Sind die Atomorbitale reell, so kann man sich das Produkt $\rho_{jk}(\vec{r}) = \phi_j(\vec{r})\phi_k(\vec{r})$ als eine Ladungsdichte vorstellen. Das entsprechende elektrostatische Potential entspricht dann gerade dem Kernanziehungsintegral I , wie man durch Vergleich von Gl. (10.1) und (10.18) leicht einsieht.

Insbesondere kann man die exakte Entwicklung (10.3) nach Kugelflächenfunktionen und die approximative Multipolentwicklung (10.6) sinngemäß anwenden.

Verfahren dieser Art wurde in jüngerer Zeit vor allem von Fernández Rico und Mitarbeitern [112, 113, 114, 115, 116, 117, 118, 119, 120] sowie Jones und Mitarbeitern [188, 189, 190, 191, 192, 193, 194, 195, 196, 197] untersucht.

Diese Arbeiten wurden von der Gruppe um Bouferguene aufgegriffen, und man hat in einigen Arbeiten versucht, Konvergenzbeschleunigung für Entwicklungen analog zu Gl. (10.3) zu verwenden, wobei der ϵ -Algorithmus eingesetzt wurde. [37, 38]

Da es sich im wesentlichen um Orthogonalentwicklungen handelt, ist zu erwarten, daß spezielle Methoden für diesen Typ von Reihen vorteilhaft sind.

10.3 Ein einfaches Beispiel

Wir betrachten als einfaches Beispiel einer Ladungsdichte

$$\rho(\vec{r}) = \exp(-\alpha r) \exp(-\beta|\vec{r} - \vec{R}|) \quad (10.25)$$

entsprechend einem zweizentrierten Produkt von 1s-Exponentialfunktionen. Für das elektrostatische Potential dieser Dichte gilt

$$\begin{aligned}
U(\vec{r}) &= \int \frac{\exp(-\alpha r') \exp(-\beta |\vec{r}' - \vec{R}|)}{|\vec{r}' - \vec{r}'|} d^3 r' \\
&= 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_\ell^m(\vec{r}'/r)}{2\ell + 1} \int \frac{r'_<^\ell}{r'_>^{\ell+1}} Y_\ell^{m*}(\vec{r}'/r') \\
&\quad \times \exp(-\alpha r') \exp(-\beta |\vec{r}' - \vec{R}|) d^3 r' \\
&= 4\pi \sum_{\ell m} \frac{Y_\ell^m(\vec{r}'/r)}{2\ell + 1} \int \frac{r'_<^\ell}{r'_>^{\ell+1}} Y_\ell^{m*}(\vec{r}'/r') \exp(-\alpha r') \\
&\quad \times \frac{-4\pi}{\sqrt{r'R}} \sum_{\ell' m'} Y_{\ell'}^{m'}(\vec{r}'/r') Y_{\ell'}^{m'*}(\vec{R}/R) \\
&\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_{\ell'+1/2}(\beta r'_<) K_{\ell'+1/2}(\beta r'_>) d^3 r'
\end{aligned} \tag{10.26}$$

mit $r'_< = \min(r', R)$ und $r'_> = \max(r', R)$. Hier wurde das Additionstheorem [386, 37]

$$\exp(-\lambda \sqrt{r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \theta}) = - \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) P_\ell(\cos \theta) \frac{1}{\sqrt{r\rho}} \frac{\partial}{\partial \lambda} [I_{\ell+1/2}(\lambda r) K_{\ell+1/2}(\lambda \rho)] \tag{10.27}$$

verwendet, das für $r < \rho$ gilt. Ferner wurde das Additionstheorem (10.8) der Kugelflächenfunktionen benutzt. Jetzt kann man die Orthonormalität der Kugelflächenfunktionen benutzen und erhält

$$\begin{aligned}
U(\vec{r}) &= \frac{-4\pi}{\sqrt{R}} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\vec{r} \cdot \vec{R}/(rR)) \int_0^\infty r'^{3/2} \frac{r'_<^\ell}{r'_>^{\ell+1}} \exp(-\alpha r') \\
&\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_{\ell+1/2}(\beta r'_<) K_{\ell+1/2}(\beta r'_>) d r' .
\end{aligned} \tag{10.28}$$

Das verbleibende Radialintegral kann man mit Hilfe von Maple berechnen. Dadurch vermeidet man Rundungsfehler, die sonst bei der Berechnung dieses Integrals leicht auftreten [37]. Wir bemerken, daß das Ergebnis von der Form (10.17) ist, mit

$$\tilde{z}_\ell(r) = \frac{-4\pi}{\sqrt{R}} \int_0^\infty r'^{3/2} \frac{r'_<^\ell}{r'_>^{\ell+1}} \exp(-\alpha r') \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right) I_{\ell+1/2}(\beta r'_<) K_{\ell+1/2}(\beta r'_>) d r' . \tag{10.29}$$

Analog ergibt sich für die Multipolentwicklung dieser Ladungsdichte eine Gleichung der Form (10.9),

$$\begin{aligned}
U_Q(\vec{r}) &= \frac{-4\pi}{\sqrt{R}} \sum_{\ell=0}^{\infty} P_\ell(\vec{r} \cdot \vec{R}/(rR)) \int_0^\infty r'^{3/2} \frac{r'^\ell}{r^{\ell+1}} \exp(-\alpha r') \\
&\quad \times \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right) [I_{\ell+1/2}(\beta r'_<) K_{\ell+1/2}(\beta r'_>)] d r' ,
\end{aligned} \tag{10.30}$$

und für die Multipolmomente folgt

$$q_\ell = \frac{-4\pi}{\sqrt{R}} \int_0^\infty r'^{3/2+\ell} \exp(-\alpha r') \left(\frac{\partial}{\partial \beta} \right) [I_{\ell+1/2}(\beta r'_<) K_{\ell+1/2}(\beta r'_>)] d r', \quad (10.31)$$

was man auch vorteilhaft mit Maple berechnen kann.

10.4 Numerische Tests

Wir betrachten die Ladungsdichte $\rho(\vec{r}) = \rho(x, y, z)$ aus (10.25) aus dem letzten Abschnitt für $\alpha = 3/10$, $\beta = 1$ und $\vec{R} = 2\vec{e}_z$, wobei \vec{e}_z der Einheitsvektor in z -Richtung ist. Diese ist rotationssymmetrisch um die z -Achse. In Abbildung 10.1 ist $\rho(x, 0, z)$ als Funktion von x und z aufgetragen.

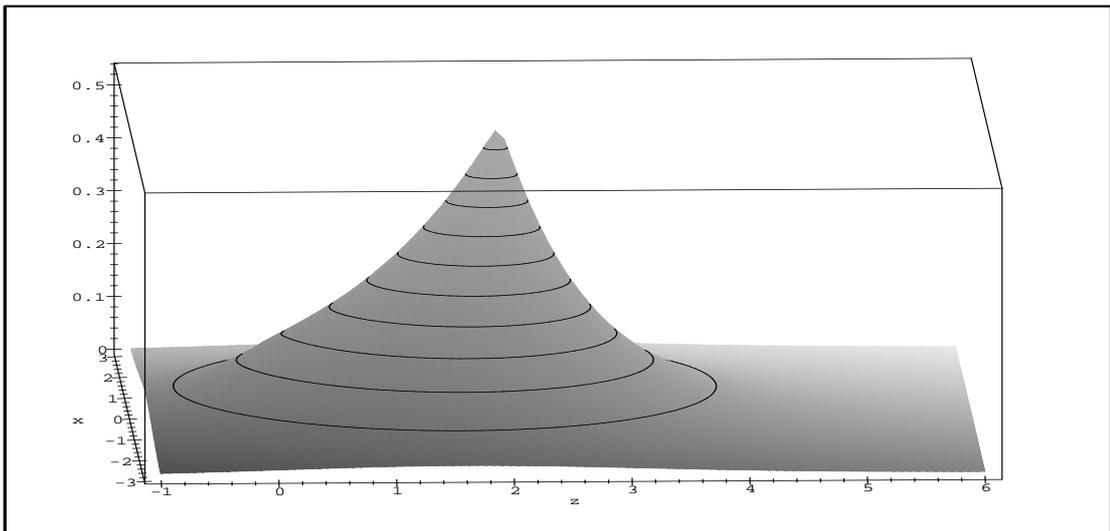


Abbildung 10.1: Ladungsdichte

Das entsprechende elektrostatische Potential ist ebenfalls rotationssymmetrisch um die z -Achse, also nur eine Funktion von z und $\sqrt{x^2 + y^2}$ oder, äquivalent, nur von $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ und θ mit $\cos \theta = z/r$. Das gilt auch für die Multipolentwicklung (10.30) und die exakte Entwicklung (10.28) nach Kugelflächenfunktionen.

10.4.1 Multipolentwicklung

Die Multipolmomente q_ℓ sind in Tabelle 10.1 aufgetragen. Sie wachsen relativ schnell mit ℓ an.

Tabelle 10.1: Multipolmomente q_ℓ

ℓ	q_ℓ	ℓ	q_ℓ
0	$9.6145542836957232 \cdot 10^0$	15	$5.6126132139082320 \cdot 10^4$
1	$1.5111468162060430 \cdot 10^1$	16	$1.0526398832720890 \cdot 10^5$
2	$2.4972140819932912 \cdot 10^1$	17	$1.9791327162842600 \cdot 10^5$
3	$4.2508094215318600 \cdot 10^1$	18	$3.7295814285560472 \cdot 10^5$
4	$7.3829280479536656 \cdot 10^1$	19	$7.0429819898685744 \cdot 10^5$
5	$1.3014160081924070 \cdot 10^2$	20	$1.3325858332275628 \cdot 10^6$
6	$2.3205220342856620 \cdot 10^2$	21	$2.5258921378457704 \cdot 10^6$
7	$4.1759801415517728 \cdot 10^2$	22	$4.7958001073652480 \cdot 10^6$
8	$7.5724460859402144 \cdot 10^2$	23	$9.1198033217610032 \cdot 10^6$
9	$1.3819758024471442 \cdot 10^3$	24	$1.7367785134246278 \cdot 10^7$
10	$2.5360253549353620 \cdot 10^3$	25	$3.3120638623127288 \cdot 10^7$
11	$4.6760909010975208 \cdot 10^3$	26	$6.3243038872318152 \cdot 10^7$
12	$8.6583940808828048 \cdot 10^3$	27	$1.2090777865352850 \cdot 10^8$
13	$1.6092055362945430 \cdot 10^4$	28	$2.3141623269443344 \cdot 10^8$
14	$3.0007868261207612 \cdot 10^4$	29	$4.4340905859803936 \cdot 10^8$

In den Tabellen 10.2-10.5 sind für verschiedene Kombinationen von r und θ die Partialsommen

$$s_\ell = \sum_{j=0}^{\ell} P_j(\cos \theta) \frac{q_j}{r^{j+1}} \quad (10.32)$$

und die transformierten Werte

$$s'_\ell = \mathcal{K}_{\ell-2}^{(\lfloor \ell/2 \rfloor)}(\{(\ell+1)^{-1}\}, \{\gamma_\ell^{(j)}\}, \{s_\ell\}, \{q_\ell/r^{\ell+1}\}) \quad (10.33)$$

mit $\gamma_\ell^{(0)} = \ell + 2$, $\gamma_\ell^{(1)} = -(2\ell + 5) \cos \theta$ und $\gamma_\ell^{(2)} = \ell + 3$ entsprechend der Rekursion der Legendre-Polynome $P_{\ell+1}(\cos \theta)$ aufgetragen. Diese Werte wurden gerundet und können daher nicht mehr als 16 Dezimalstellen aufweisen. Die Definition der \mathcal{K} -Transformation aus Gl. (5.148) wird verwendet. Außerdem ist für beide Folgen s_ℓ und s'_ℓ die erreichte Zahl exakter Stellen angegeben.

Die erreichte Stellenzahl wird zum besseren Vergleich in den Abbildungen 10.2-10.5 nochmals gesondert dargestellt. Man erkennt jeweils eine deutliche Steigerung der Stellenzahl durch die Verwendung der Extrapolationsmethode. Schon für kleinere ℓ -Werte ist die Verkleinerung des Fehlers drastisch. Ein Gewinn von drei und mehr Stellen ist typisch und bedeutet eine Verkleinerung des Fehlers um den Faktor 1000 oder mehr.

Um zu verdeutlichen, wie der Stellengewinn von r und θ abhängt, wurden auf einem Gitter in der (x, z) -Ebene an jedem Punkt die Zahl exakter Stellen der extrapolierten

Multipolentwicklung bestimmt, wenn nur die Multipolmomente bis zu einem gewissen maximalen $\ell = \ell_{\max}$ berücksichtigt wurden. Die Ergebnisse sind in den Abbildungen 10.6-10.10 dargestellt. Man sieht, daß in genügender Entfernung von den Zentren am Ursprung und bei $\vec{R} = 2\vec{e}_z$ schon für kleine ℓ ein große Zahl von Stellen exakt ist. Mit wachsendem ℓ_{\max} wird an immer mehr Punkten des Gitters die maximale Stellenzahl 16 erreicht.

Tabelle 10.2: \mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung (10.30) für $r = 4$ und $\theta = 60$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
11	2.7418043436441288	2.7418396451187988	4.9	8.5
13	2.7418444420453968	2.7418396360933220	5.8	9.8
15	2.7418400997161048	2.7418396365510044	6.8	11.3
17	2.7418393319135280	2.7418396365368780	7.0	13.2
19	2.7418396810712432	2.7418396365366408	7.8	13.6
21	2.7418396408021740	2.7418396365367192	8.8	14.6
23	2.7418396335310588	2.7418396365367116	9.0	∞
25	2.7418396369949232	2.7418396365367116	9.8	∞

Tabelle 10.3: \mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 4$ und $\theta = 2$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
5	4.0055910661641912	4.0310298596769504	2.2	6.0
7	4.0258375726969488	4.0310259627927432	2.9	8.1
9	4.0299452870267560	4.0310259342473168	3.6	10.3
11	4.0307974518518776	4.0310259340256136	4.2	12.5
13	4.0309770827258808	4.0310259340268592	4.9	14.2
15	4.0310154000570728	4.0310259340268832	5.6	∞
17	4.0310236476902344	4.0310259340268832	6.2	∞
19	4.0310254353074664	4.0310259340268832	6.9	∞

10.4.2 Exakte Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen

In den Tabellen 10.6-10.8 sind für verschiedene Kombination von r und θ die Partialsummen

$$s_\ell = \sum_{j=0}^{\ell} P_j(\cos \theta) \tilde{z}_j(r) \quad (10.34)$$

Tabelle 10.4: \mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 12$ und $\theta = 2$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
2	0.9205147491201462	0.9229094827555278	2.6	5.1
4	0.9228521264440244	0.9229028304339108	4.3	9.7
6	0.9229017067530020	0.9229028306219438	5.9	11.5
8	0.9229028050126544	0.9229028306190520	7.6	∞
10	0.9229028300243444	0.9229028306190520	9.2	∞

Tabelle 10.5: \mathcal{K} -Transformation der Multipolentwicklung für $r = 3$ und $\theta = 45$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
14	4.3489633745055632	4.3493388832962536	4.1	8.4
16	4.3492565069391536	4.3493388972986296	4.7	9.5
18	4.3493913460628168	4.3493388992014864	4.9	10.0
20	4.3493504034221608	4.3493388987593184	5.6	11.1
22	4.3493312030632704	4.3493388987929736	5.8	12.6
24	4.3493372120197552	4.3493388987948584	6.4	12.8
26	4.3493400696609064	4.3493388987940592	6.6	13.7
28	4.3493391551806856	4.3493388987941480	7.2	∞

der exakten Entwicklung (10.28) und die transformierten Werte

$$s'_\ell = \mathcal{K}_{\ell-2\lfloor\ell/2\rfloor}^{(\lfloor\ell/2\rfloor)}(\{(\ell+1)^{-1}\}, \{\gamma_\ell^{(j)}\}, \{s_\ell\}, \{\tilde{z}_\ell(r)\}) \quad (10.35)$$

mit $\gamma_\ell^{(0)} = \ell + 2$, $\gamma_\ell^{(1)} = -(2\ell + 5) \cos \theta$ und $\gamma_\ell^{(2)} = \ell + 3$ entsprechend der Rekursion der Legendre-Polynome $P_{\ell+1}(\cos \theta)$ aufgetragen. Wie im Fall der Multipolentwicklung sind diese Werte gerundet und können nicht mehr als 16 Dezimalstellen aufweisen. Die Definition der \mathcal{K} -Transformation aus Gl. (5.148) wird verwendet. Außerdem ist für beide Folgen s_ℓ und s'_ℓ die erreichte Zahl exakter Stellen angegeben.

Durch Vergleich der Tabellen 10.2 mit 10.6, 10.3 mit 10.7 und 10.4 mit 10.8, die jeweils am gleichen Punkt ausgewertet wurden, erkennt man, daß sich die konvergierten, extrapolierten Werte durchaus unterscheiden. Das heißt, daß auf diese Weise die Differenz $U - U_Q$ ausgerechnet werden kann.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Beschleunigung der Entwicklung nach Legendre-Polynomen mittels der \mathcal{K} -Transformation sowohl für den Fall der Multipolentwicklung als auch für den Fall der exakten Berechnung des elektrostatischen Potentials deutliche Stellengewinne erzielen läßt. Anders ausgedrückt reichen zur Erzielung einer gewünschten Genauigkeit deutlich weniger Multipolmomente beziehungsweise Entwicklungskoeffizienten aus, wenn man eine problemangepaßte Extrapolationsmethode wie die \mathcal{K} -Transformation verwendet.

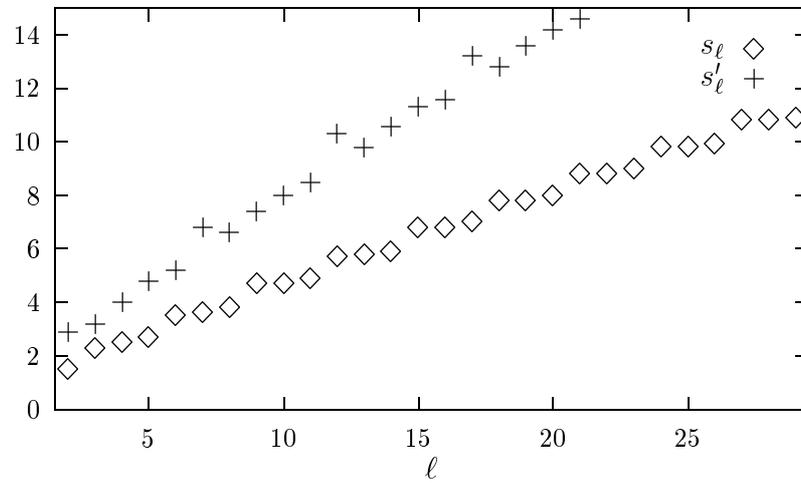


Abbildung 10.2: Zahl exakter Stellen bei der Multipolentwicklung für $r = 4$ und $\theta = 60$ Grad.

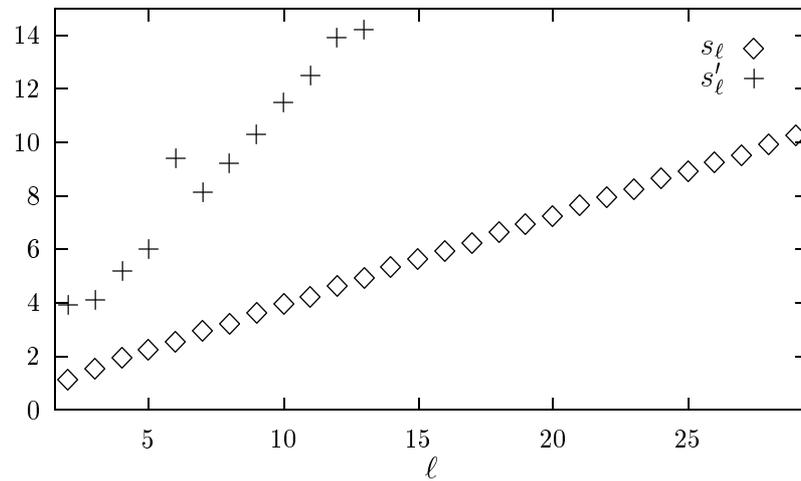


Abbildung 10.3: Zahl exakter Stellen bei der Multipolentwicklung für $r = 4$ und $\theta = 2$ Grad.

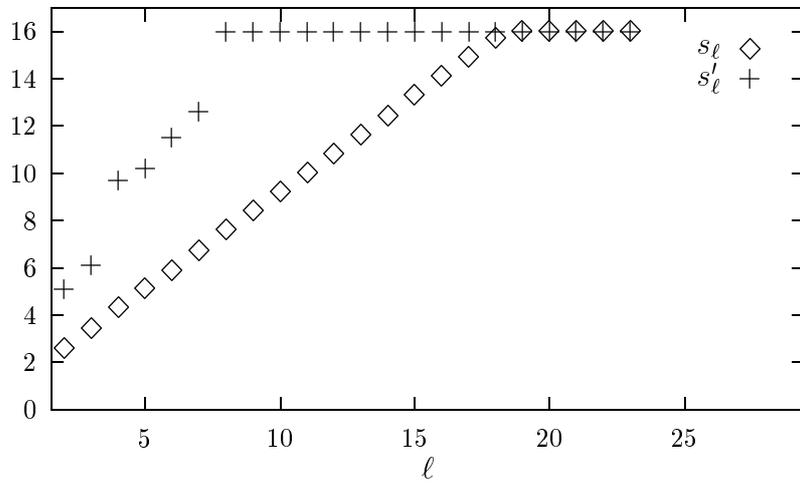


Abbildung 10.4: Zahl exakter Stellen bei der Multipolentwicklung für $r = 12$ und $\theta = 2$ Grad.

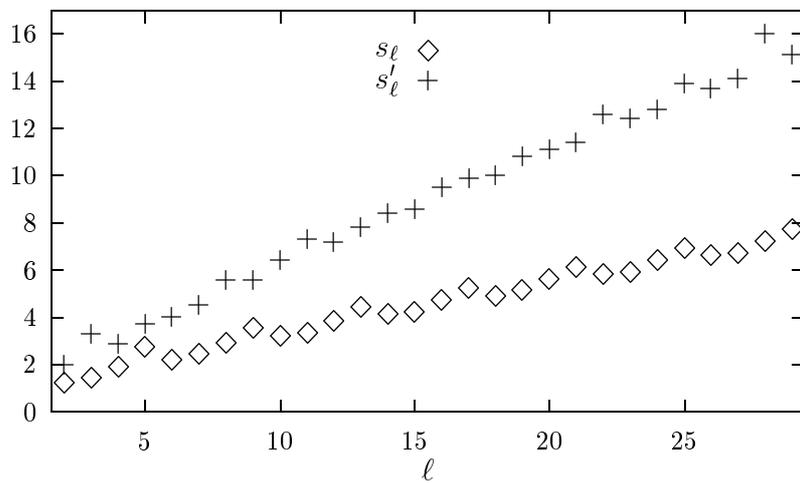
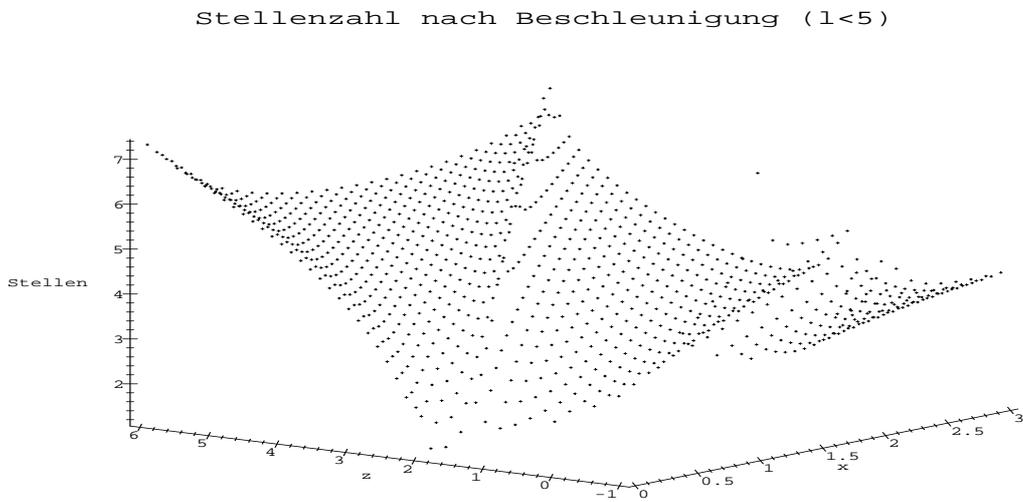
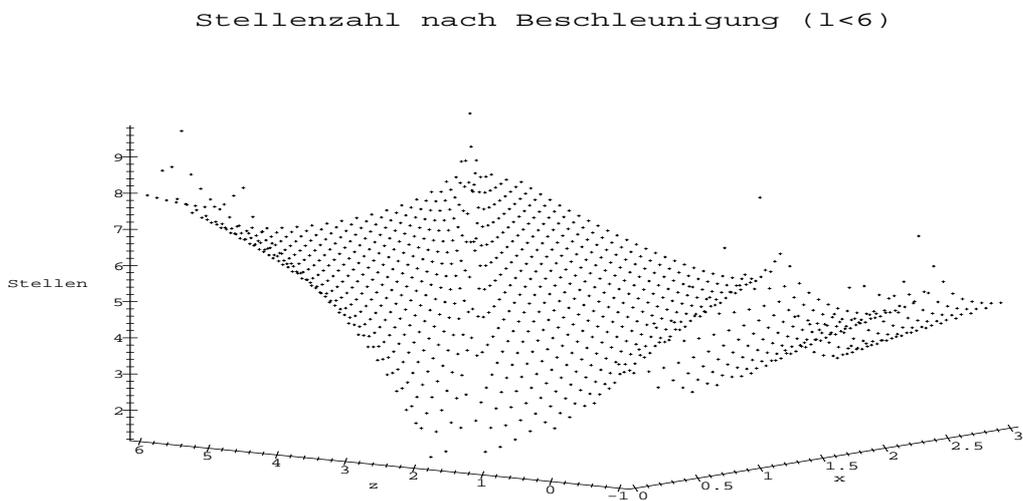


Abbildung 10.5: Zahl exakter Stellen bei der Multipolentwicklung für $r = 3$ und $\theta = 45$ Grad.

Abbildung 10.6: Stellenzahl der beschleunigten Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 4$ Abbildung 10.7: Stellenzahl der beschleunigten Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 5$

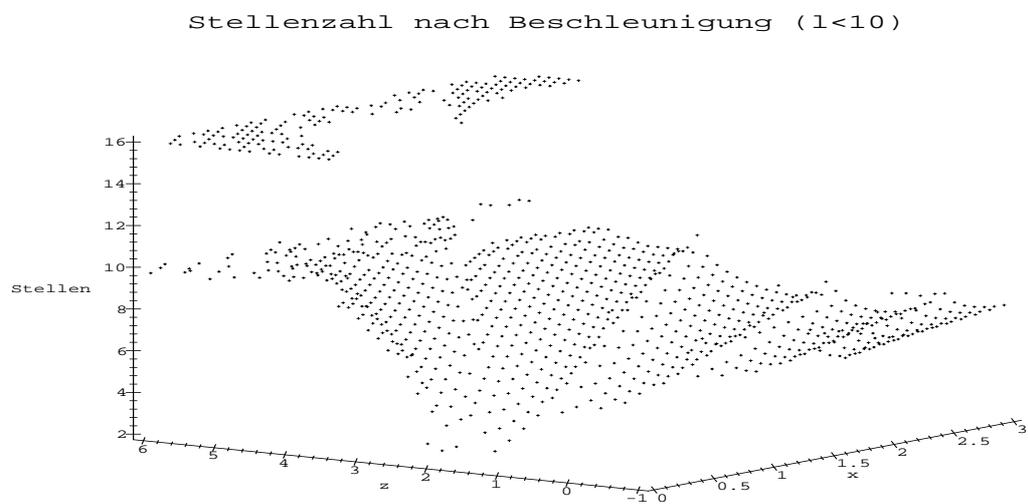


Abbildung 10.8: Stellenzahl der beschleunigten Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 9$

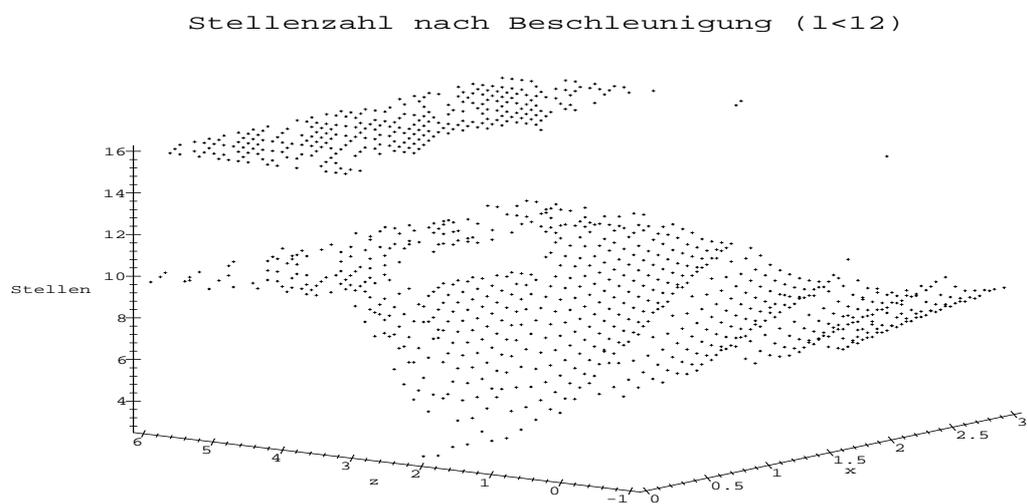
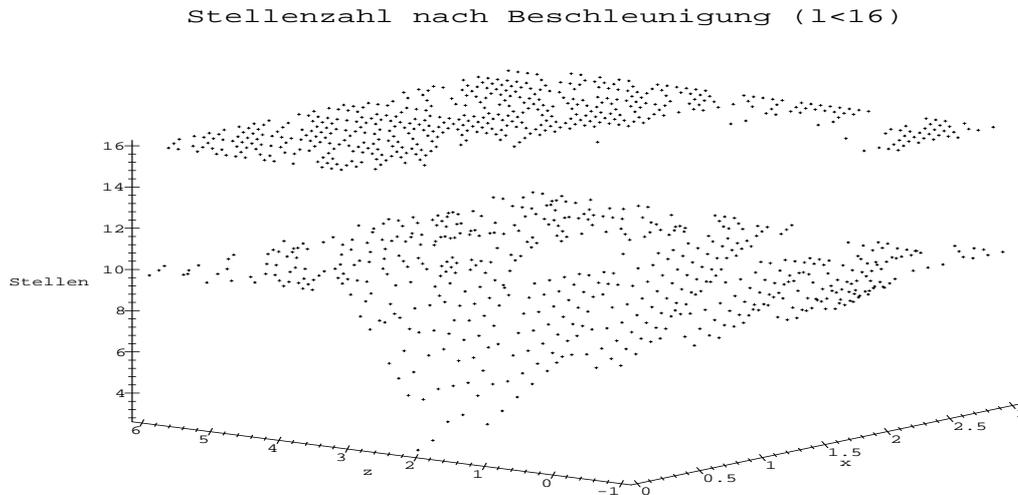


Abbildung 10.9: Stellenzahl der beschleunigten Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 11$

Abbildung 10.10: Stellenzahl der beschleunigten Multipolentwicklung für $\ell_{\max} = 15$ Tabelle 10.6: \mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 4$ und $\theta = 60$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
5	2.6360864318669988	2.6377072675101864	3.2	5.2
6	2.6374837369057832	2.6377515327293168	4.0	5.0
7	2.6378518176502576	2.6377253830860056	4.3	6.0
8	2.6378042659979908	2.6377219784704452	4.5	6.4
9	2.6377350134378020	2.6377230006666316	5.3	8.6
10	2.6377151544952184	2.6377230256403856	5.5	8.2
11	2.6377179511190400	2.6377230015625168	5.7	8.7
12	2.6377222605455336	2.6377230070377540	6.5	10.9
13	2.6377235638641044	2.6377230071786740	6.7	10.2
14	2.6377233701261704	2.6377230069889060	6.9	11.1
15	2.6377230603586148	2.6377230070087064	7.7	12.7
16	2.6377229633254132	2.6377230070085216	7.8	12.8
17	2.6377229782819236	2.6377230070080356	8.0	13.5
18	2.6377230028127904	2.6377230070081392	8.8	14.2
19	2.6377230106880184	2.6377230070081228	8.9	∞
20	2.6377230094424720	2.6377230070081228	9.0	∞

Tabelle 10.7: \mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 4$ und $\theta = 2$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
10	4.5865590596837048	4.5866525846910224	4.7	6.4
12	4.5866776132666136	4.5866544475900856	5.3	7.7
14	4.5866762505499168	4.5866543754774488	5.3	8.5
16	4.5866652462194176	4.5866543587750376	5.6	9.4
18	4.5866588085511440	4.5866543606914784	6.0	10.8
20	4.5866559736808440	4.5866543607829960	6.5	11.4
22	4.5866548859890528	4.5866543607630656	6.9	13.1
24	4.5866545102511760	4.5866543607625712	7.5	13.5
26	4.5866543942048184	4.5866543607627224	8.1	15.3
28	4.5866543637663352	4.5866543607627240	9.2	15.5

Tabelle 10.8: \mathcal{K} -Transformation der Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen für $r = 12$ und $\theta = 2$ Grad

ℓ	s_ℓ	s'_ℓ	$-\lg 1 - s_\ell/s $	$-\lg 1 - s'_\ell/s $
2	0.9205059009697086	0.9228996042830154	2.6	5.1
3	0.9225472237960400	0.9228930830704692	3.4	6.0
4	0.9228417168669332	0.9228922656178376	4.3	8.2
5	0.9228847832640386	0.9228922593965848	5.1	9.8
6	0.9228911451439840	0.9228922591923836	5.9	10.3
7	0.9228920922347056	0.9228922592384774	6.7	11.4
8	0.9228922340878756	0.9228922592424316	7.6	12.6
9	0.9228922554386146	0.9228922592422232	8.4	13.6
10	0.9228922586651554	0.9228922592421988	9.2	15.0
11	0.9228922591544072	0.9228922592421998	10.0	15.7
12	0.9228922592288100	0.9228922592421998	10.8	16.0

Kapitel 11

Quasiteilchenenergien und die inverse Dyson-Gleichung

Dieser Abschnitt stützt sich auf [166].

Trotz des unbestreitbaren Erfolgs des Hartree-Fock(HF)-Self-Consistent-Field(SCF)-Verfahrens hat es auch einige Schwachpunkte. Beispiele sind die näherungsweise Berechnung von Elektronenaffinitäten und Ionisierungsenergien über Einteilchenenergien mittels des Theorems von Koopmans. [345, S. 127] Es ist wohlbekannt, daß Koopmans-Ionisierungsenergien relativ gute Näherungen an das Experiment darstellen, während Koopmans-Elektronenaffinitäten Fehler von mehreren eV aufweisen. Dies wird durch Unterschiede zwischen Ion und neutralem System bedingt, die sich auf Orbitalrelaxationseffekte aufgrund unterschiedlicher HF-Orbitale sowie auf unterschiedliche Korrelationsenergien erstrecken. Diese beiden Effekte bedingen Fehler, die für Ionisierungsenergien von unterschiedlichem Vorzeichen sind und sich näherungsweise aufheben, während für Elektronenaffinitäten die Fehler gleiches Vorzeichen haben und sich daher addieren. [5, 94] Man kann sagen, daß vor allem die Energien von virtuellen HF-Orbitalen unzuverlässig sind. Als eine Folge dieser Fehler approximieren die HF-SCF-Energien von HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) und LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) im Falle von Molekülen bzw. die Bandkanten von Valenz- und Leitungsband auf HF-SCF-Niveau im Falle des Festkörpers die spektroskopischen Resultate nicht besonders gut. Man benötigt daher Einteilchenenergien, die hinsichtlich Korrelationseffekten korrigiert sind, die sogenannten *Quasiteilchenenergien*. Diese sind als Pole der Einteilchen-Green-Funktion(GF) definiert, die man in einem Vielteilchenformalismus berechnet.¹ Die Einteilchen-GF ist die Lösung der *Dyson-Gleichung* und hängt von der *Selbstenergie* ab, die man als ein energieabhängiges, effektives Potential interpretieren kann.

Die Quasiteilchenenergien sind die exakten Energiedifferenzen zwischen Systemen mit N und $N \pm 1$ Teilchen. Der GF-Formalismus erlaubt, in systematischer Weise Korrekturen zu den HF-Einteilchenenergien zu bestimmen und so genauere Ionisierungsenergien,

¹Eine leicht zugängliche Einführung in GF-Methoden findet man in Buch von Szabo und Ostlund [345, Kap. 7].

Elektronenaffinitäten und elektronische Spektren zu berechnen. Der störungstheoretische GF-Formalismus erfordert nur die vertrauten Zweielektronenintegrale sowie die Energien der HF-Orbitale. In diesem Formalismus wird die Selbstenergie mit Vielteilchenstörungstheorie bestimmt.

Der Hauptvorteil des GF-Formalismus ist, daß er die Beschreibung von Korrelations-effekten auf dem Einteilchenniveau ermöglicht.

Die fehlerhaften HF-Einteilchenenergien stören besonders im Falle von *ab initio* Berechnungen von Bandstrukturen von Polymeren oder Festkörpern mit der Methode der Kristallorbitale (Crystal Orbitals (CO)) im Rahmen des LCAO-Verfahrens (Linear Combination of Atomic Orbitals). [7, 8, 9, 10, 11, 291, 219, 217, 218, 232, 279, 284] Als Beispiel genannt sei die Bandlücke in alternierendem *trans*-Polyacethylen, für die man im Rahmen des HF-Verfahrens 4.427 eV ausrechnet, während Quasiteilchenmethoden auf dem MP2-Niveau (Møller-Plesset-Störungstheorie 2. Ordnung [254]) das Resultat 2.980 eV liefern, wenn man eine 6-31G** Basis verwendet. [219, Tab. 5.4] Der zweite Wert ist schon sehr viel dichter an dem experimentellen Ergebnis von etwa 2 eV für den ersten Peak im Absorptionsspektrum des reinen Polymers [219, S. 211]. Die verbleibende Differenz ist wahrscheinlich ein kombinierter Effekt von Basissatzmängeln und verbesserungswürdiger Beschreibung der Elektronenkorrelation.

Programme für die Berechnung der Korrelationskorrekturen sind verfügbar [271], aber die Verbesserung ihrer Effizienz ist Gegenstand aktueller Forschung [277].

Die Berechnung von Korrelationskorrekturen für Bandstrukturen kann auf der Basis der MP-Störungstheorie [219], von GF-Methoden [224, 225, 226] und oder auch des Coupled-Cluster(CC)-Verfahrens [20, 21, 33, 75, 76, 125, 129, 157, 215, 258, 275, 276, 348, 347, 402] erfolgen. Einen Überblick über die Literatur zu diesem Thema findet man bei Förner [125].

Im folgenden untersuchen wir die Kombination von Extrapolationsmethoden mit dem Zugang [126], der auf der iterativen Lösung der inversen Dyson-Gleichung in diagonaler Näherung gründet. Die Iteration konvergiert, wenn die größte Polstärke größer als 1/2 ist, jedoch mitunter relativ langsam [126].

Wir geben in Abschnitt 11.1 zunächst eine kurze Einführung in die Berechnung von Quasiteilchenkorrekturen im Kontext der inversen Dyson-Gleichung.

Dann wird in Abschnitt 11.2 anhand von Beispielen gezeigt, daß die Konvergenz der Lösung der inversen Dyson-Gleichung mittels direkter Iteration durch die Verwendung von Extrapolationsverfahren deutlich beschleunigt werden kann. In Abschnitt 11.2.1 werden Beispiele untersucht, die diskreten Spektren wie im Falle von LCAO-Rechnungen an Molekülen entsprechen, in Abschnitt 11.2.2 solche, die CO-Rechnungen korrespondieren, wobei das einfache Tight-binding-Modellbeispiel von Förner [126] behandelt wird. Die Beispiele sind sehr vereinfacht und so gewählt, daß alle mathematisch wichtigen Strukturen berücksichtigt werden, ohne spezifische chemische Systeme zu beschreiben. Das Ziel ist also nicht, physikalische Einsichten zu gewinnen, sondern verbesserte numerische Methoden für die Lösung der inversen Dyson-Gleichung darzustellen.

11.1 Physikalische Grundlagen

In diesem Abschnitt wird ein Abriss einer Methode für die Berechnung von Quasiteilchenkorrekturen auf der Grundlage der inversen Dyson-Gleichung in diagonalen Näherung [126, 225, 226] gegeben. Die Darstellung folgt eng der in [126]. Allerdings werden nur die wesentlichen Resultate angegeben. Wie oben bemerkt, kann auch das Buch von Szabo und Ostlund [345, Kap. 7] für weitere Details hinsichtlich der Anwendung von GF-Methoden im molekularen Fall herangezogen werden. Für GF-Verfahren in Anwendung auf Polymere ist das Buch von Ladik [219, Kap. 4,5] eine reichhaltige Informationsquelle.

Bei geeigneter Wahl von Basisfunktionen verbindet die Dyson-Gleichung die Matrixelemente $G_{IJ}(\omega)$ der korrelierten Green-Funktion bei der Energie ω mit Matrixelementen $G_{IJ}^{(0)}(\omega)$ der ungestörten Green-Funktion gemäß

$$G_{IJ}(\omega) = G_{IJ}^{(0)}(\omega) + \sum_{KL} G_{IK}^{(0)}(\omega) M_{KL}(\omega) G_{LJ}(\omega). \quad (11.1)$$

Die ungestörte Green-Matrix kann man diagonal wählen,

$$G_{IJ}^{(0)}(\omega) = (\omega - \epsilon_I)^{-1} \delta_{IJ} \quad (11.2)$$

wobei ϵ_I die entsprechenden SCF-Eigenwerte sind. In Gl. (11.1) sind die Größen $M_{KL}(\omega)$ die Matrixelemente der Selbstenergie. Bei Rechnungen an Molekülen sind sie in Störungstheorie zweiter Ordnung durch [345, Gl. (7.38)]

$$2M_{IJ}(\omega) = \sum_{ARS} \frac{\langle RS||IA\rangle\langle JA||RS\rangle}{\omega + \epsilon_A - \epsilon_R - \epsilon_S} + \sum_{ABR} \frac{\langle AB||IR\rangle\langle JR||AB\rangle}{\omega + \epsilon_R - \epsilon_A - \epsilon_B} \quad (11.3)$$

gegeben, mit besetzten Zuständen A, B und virtuellen Zuständen R, S . Dabei treten antisymmetrisierte Zweielektronenintegrale

$$\langle IK||JL\rangle = \left\langle \chi_I(1)\chi_K(2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \chi_J(1)\chi_L(2) - \chi_L(1)\chi_J(2) \right\rangle \quad (11.4)$$

zwischen Spinorbitalen χ_I auf. In diagonalen Näherung setzt man

$$M_{IJ}(\omega) = M_{II}(\omega)\delta_{IJ}. \quad (11.5)$$

Verwendet man räumliche Orbitale ϕ_I mit Zweielektronenmatrixelementen

$$V_{IK}^{JL} = \left\langle \phi_I(1)\phi_K(2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_J(1)\phi_L(2) \right\rangle = (IJ|KL), \quad (11.6)$$

die der Deutlichkeit halber auch in der in der Quantenchemie üblichen Schreibweise angegeben sind, so sind in MP Störungstheorie 2. Ordnung, also auf dem MP2-Niveau, die

Selbstenergien durch

$$\begin{aligned}
 M_{II}(\omega_I) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\sum_{JRS} \frac{V_{IJ}^{RS} (2V_{IJ}^{RS} - V_{JI}^{RS})^*}{\omega_I + \epsilon_J - \epsilon_R - \epsilon_S + i\eta} \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{JKR} \frac{V_{IR}^{JK} (2V_{IR}^{JK} - V_{RI}^{JK})^*}{\omega_I - \epsilon_J - \epsilon_K + \epsilon_R - i\eta} \right], \\
 M_{RR}(\omega_R) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\sum_{JST} \frac{V_{RJ}^{ST} (2V_{RJ}^{ST} - V_{JR}^{ST})^*}{\omega_R + \epsilon_J - \epsilon_S - \epsilon_T + i\eta} \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{JKS} \frac{V_{RS}^{JK} (2V_{RS}^{JK} - V_{SR}^{JK})^*}{\omega_R - \epsilon_J - \epsilon_K + \epsilon_S - i\eta} \right].
 \end{aligned} \tag{11.7}$$

gegeben. Hier gehören Indizes I, J, K zu doppelt besetzten und Indizes R, S, T zu virtuellen Zuständen. Im Falle von Molekülen kann man hier einfach den Grenzwert $\eta \rightarrow 0^+$ ausführen, nicht jedoch im später behandelten CO-Fall.

Der wichtige Punkt ist, daß die relativ kompliziert wirkende Selbstenergie in Gl. (11.7) eine sehr einfache mathematische Struktur hat: Es handelt sich um eine Summe über Terme der allgemeinen Form $a/(\omega + b)$. Beispielsweise kann man die erste dreifache Summe in Gl. (11.7) für festes I als eine einzelne, lange Summe

$$\sum_{\nu=\{JRS\}} a_\nu / (\omega + b_\nu) \tag{11.8}$$

mit

$$a_\nu = V_{IJ}^{RS} (2V_{IJ}^{RS} - V_{JI}^{RS})^*, b_\nu = \epsilon_J - \epsilon_R - \epsilon_S \tag{11.9}$$

auffassen. Die zweite dreifache Summe kann man analog umschreiben. Demnach kann die gesamte rechte Seite von Gl. (11.7) als (endliche) Summe

$$f(\omega) = \sum_{\nu} \frac{a_\nu}{\omega + b_\nu} \tag{11.10}$$

geschrieben werden, was die Struktur einer Partialbruchzerlegung hat. Die Parameter a und b kann man dabei aus Standarddaten (Zweielektronenintegrale, SCF-Energien) von elektronischen *ab initio* Methoden berechnet werden.

Im Falle von HF-Kristallorbitalen bedeutet eine Summation über einen Index I eine Summation über einen entsprechenden Bandindex i und zusätzlich eine Integration über den Quasiimpuls k_i (geteilt durch 2π):

$$\sum_I \longrightarrow \sum_i \int \frac{d k_i}{2\pi} \tag{11.11}$$

In diesem Fall sind die Zweielektronenintegrale V_{IJ}^{KL} als Funktion der HF-Kristallorbitale $\phi_i^k(l)$ in Band i zum Quasiimpuls k für Elektron l durch

$$V_{IJ}^{KL} = \left\langle \phi_i^{k_i}(1) \phi_j^{k_j}(2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \phi_k^{k_k}(1) \phi_l^{k_l}(2) \right\rangle \tag{11.12}$$

gegeben.

Die Dyson-Gleichung kann man auch als Matrixgleichung

$$\mathbf{G}(\omega) = ([\mathbf{G}^{(0)}(\omega)]^{-1} - \mathbf{M}(\omega))^{-1} \quad (11.13)$$

schreiben.

Quasiteilchenenergien erhält man als Pole der korrelierten Green-Matrix $\mathbf{G}(\omega)$ oder, gleichbedeutend, als Lösungen der Säkulargleichung

$$\det[\omega \mathbf{I} - \mathbf{E} - \mathbf{M}(\omega)] = 0, \quad (11.14)$$

wobei \mathbf{I} die Einheitsmatrix und $\mathbf{E} = \text{diag}(\epsilon_I)$ die Diagonalmatrix der SCF-Energien ist. Diese Gleichung wird als *inverse Dyson-Gleichung* bezeichnet.

In diagonalen Näherung faktorisiert die Säkulardeterminante. Folglich verknüpft die inverse Dyson-Gleichung in diagonalen Näherung die Quasiteilchenenergie ω_I von Zustand I mit dem entsprechenden SCF-Eigenwert ϵ_I über die diagonale Selbstenergie $M_{II}(\omega_I)$ gemäß

$$\omega_I = \epsilon_I + M_{II}(\omega_I). \quad (11.15)$$

Die j -te Wurzel der inversen Dyson-Gleichung (11.15) bezeichnen wir als ω_{jI} . Hier kann I ein Index für einen besetzten oder einen virtuellen Zustand sein. Die Polstärke zu ω_{jI} ist definiert als

$$P_{jI} = \left[1 - \left. \frac{\partial M_{II}(\omega)}{\partial \omega} \right|_{\omega=\omega_{jI}} \right]^{-1}. \quad (11.16)$$

Die Quasiteilchennäherung ist berechtigt, wenn die Polstärke eines bestimmten Pols von Gl. (11.15) viel größer ist als die Polstärken der anderen Pole. Solch einen Pol bezeichnen wir als *Hauptwurzel* (*principal root*).

Von jetzt an vernachlässigen wir zur Vereinfachung den Index I des jeweiligen Zustandes.

Im Fall von diskreten Spektren, wie sie bei quantenchemischen Rechnungen an Molekülen auftreten, kann man die inverse Dyson-Gleichung in diagonalen Näherung auf dem MP2-Niveau vereinfachen. Wir formulieren sie als Problem der Nullstellenbestimmung

$$F(\omega_j) = 0, \quad j = 1, \dots, M + 1, \quad (11.17)$$

einer neuen Funktion F , die durch

$$F(\omega) = \omega - \epsilon - f(\omega) \quad (11.18)$$

definiert ist. Hierbei ist $f(\omega)$ die oben beschriebene Partialbruchzerlegung der Selbstenergie

$$f(\omega) = \sum_{i=1}^M \frac{a_i}{\omega + b_i} \quad (11.19)$$

und $M \in \mathbb{N}$ ist eine geeignete natürliche Zahl. Die Polstärken der $M + 1$ Lösungen ω_j sind dann durch

$$P_j = \frac{1}{1 - f'(\omega_j)} = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^M \frac{a_i}{(\omega_j + b_i)^2}} \quad (11.20)$$

gegeben. Sie sind mit der Green-Funktion über

$$G(\omega) = [\omega - \epsilon - f(\omega)]^{-1} = \sum_{j=1}^{M+1} \frac{P_j}{\omega - \omega_j}, \quad P_j = \text{Res}_{\omega_j} G(\omega) \quad (11.21)$$

verknüpft und erfüllen

$$\sum_{j=1}^{M+1} P_j = 1, \quad 0 < P_j < 1. \quad (11.22)$$

Wie von Förner gezeigt [126], konvergiert eine Lösung der inversen Dyson-Gleichung durch direkte Iteration mit dem HF-Eigenwert als Startpunkt gemäß

$$\begin{aligned} \omega^{(0)} &= \epsilon, \\ \omega^{(1)} &= \epsilon + f(\omega^{(0)}) = \epsilon + f(\epsilon), \quad \dots \\ \omega^{(\mu)} &= \epsilon + f(\omega^{(\mu-1)}), \quad \dots \end{aligned} \quad (11.23)$$

nur dann, wenn es eine Lösung mit $1/2 < P_j \leq 1$ gibt. Die letztere ist dann der Grenzwert der Iteration. Aus Gl. (11.22) folgt, daß im Falle der Konvergenz die Polstärke der erhaltenen Lösung größer ist als die Polstärke jeder anderen Lösung. Mit anderen Worten erfolgt Konvergenz nur zu einer Hauptwurzel. Man kann also mit diesem Verfahren nur Lösungen erhalten, die physikalisch sinnvoll sind und für die die Quasiteilchennäherung berechtigt ist.

Im Fall von CO-Rechnungen an Polymeren ist die Situation ähnlich. Hier kann die inverse Dyson-Gleichung auf die Form

$$\omega = \epsilon(k) + f(k, \omega) \quad (11.24)$$

gebracht werden, wobei

$$f(k, \omega) = \frac{1}{4\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{j'} \int_{-\pi}^{\pi} dk' \int_{-\pi}^{\pi} dk'' \frac{a_{j'}(k, k', k'')}{\omega + b_{j'}(k, k', k'', \eta)} \quad (11.25)$$

der Partialbruchzerlegung $f(\omega)$ im molekularen Fall ähnelt. Die Parameterfunktionen a and b kann man aus Standarddaten (Zweielektronenintegralen, SCF-Energien) des CO-Verfahrens berechnen. Da in diagonalen Näherungen Gleichungen für unterschiedliche Werte von k voneinander unabhängig sind, wird die Abhängigkeit von k im folgenden unterdrückt.

Die Polstärken kann man dann über

$$P_j = \left\{ 1 + \frac{1}{4\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{j'} \int_{-\pi}^{\pi} dk' \int_{-\pi}^{\pi} dk'' \frac{a_{j'}(k, k', k'')}{[\omega + b_{j'}(k, k', k'', \eta)]^2} \right\}^{-1} \quad (11.26)$$

berechnen.

Förner [126] hat ein vereinfachtes Modell vom Tight-Binding-Typ für eine Kette mit zwei äquivalenten Plätzen pro Elementarzelle vorgeschlagen. In diesem Modell werden ein Band mit $\epsilon_1(k) = a + 2 \cos(k/2)$ und ein Band mit $\epsilon_2(k) = -a - 2 \cos(k/2)$ verwendet, die durch eine Bandlücke $2a > 0$ getrennt sind. Die Selbstenergie wird durch die Funktion

$$\begin{aligned} \Omega(\omega) &= \frac{1}{4\pi^2} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\pi}^{\pi} dk \left\{ \frac{1}{\omega + 3a + i\eta + 2 \cos \frac{k}{2}} + \frac{1}{\omega - 3a - i\eta - 2 \cos \frac{k}{2}} \right\} \\ &= \frac{2}{\pi^2} [H_1(\omega) + H_2(\omega)] \end{aligned} \quad (11.27)$$

mit

$$H_1(\omega) = \frac{\operatorname{sgn}(\omega + 3a + 2)}{\sqrt{(\omega + 3a)^2 - 4}} \arctan \sqrt{\frac{\omega + 3a - 2}{\omega + 3a + 2}} \quad (11.28)$$

und

$$H_2(\omega) = \frac{\operatorname{sgn}(\omega - 3a - 2)}{\sqrt{(\omega - 3a)^2 - 4}} \arctan \sqrt{\frac{\omega - 3a + 2}{\omega - 3a - 2}} \quad (11.29)$$

modellmäßig gefaßt. Hier gilt $\operatorname{sgn}(x) = 1$ für $x \geq 0$ und $\operatorname{sgn}(x) = -1$ für $x < 0$.

Die inverse Dyson-Gleichung ist für dieses Modell also durch

$$\omega = \epsilon + \Omega(\omega) \quad (11.30)$$

gegeben.

Es sei betont, daß es sich bei dem Modell von Förner nicht um ein physikalisches Modell handelt, sondern um ein eher mathematisches zum Studium von auftretenden Konvergenzproblemen, das aber wesentliche physikalische Aspekte beinhaltet.

11.2 Numerische Tests

Wir verwenden das Overholt-Verfahren (2.60) für die Beschleunigung der durch direkte Iteration (11.23) erhaltenen Iterationsfolge.

Die im folgenden beschriebenen numerischen Tests belegen, daß die vorgeschlagene Methode gut funktioniert.

Außer wenn etwas anderes explizit erwähnt ist, wurde bei den Rechnungen FORTRAN DOUBLE PRECISION benutzt, was etwa 14-16 Dezimalstellen entspricht.

In allen Tabellen für diskrete Spektren in Abschnitt 11.2.1, wird die Iterationsfolge $\{s_0, s_1, \dots\} = \{\epsilon, \epsilon + f(\epsilon), \dots\}$ gemäß Gl. (11.23) direkt der transformierten Folge $\{V_{n-1}^{(0)}\}$

Tabelle 11.1: Diskrete Spektren ($M = 2$, $\epsilon = 0.1$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
20	0.3906114035354	0.46621891988970
25	0.3056800855266	0.33734464666098
30	0.3587529290888	0.33679296897305
35	0.3232109378745	0.33679324925836
40	0.3459419484338	0.33679324927298
45	0.3309657563707	0.33679324927297
50	0.3406422268206	0.33679324927297

Gl. (11.31) mit $\epsilon = 0.1$, $M = 2$, $a_1 = a_2 = 0.1$, $b_1 = 0$, $b_2 = -2$.

Fehler: $F(V_{48}^{(0)}) = 6.4948046940572 \cdot 10^{-15}$,

Polstärke: $P(V_{48}^{(0)}) = 0.52144350086495$.

gegenübergestellt, die man durch Verwendung des Overholt-Verfahrens aus (2.60) und (2.70) erhält. Werte $V_{n-2}^{(0)} = V_{n-2}^{(0)}(s_0, \dots, s_{n-1})$ stehen in den gleichen Zeilen mit Werten s_{n-1} , um den Vergleich von Werten zu ermöglichen, die die gleiche Zahl von Elementen der Iterationsfolge verwenden.

Ähnlich werden in den Tabellen in Abschnitt 11.2.2 die Iterationsfolgen $\{s_0, s_1, \dots\} = \{\epsilon, \epsilon + \Omega(\epsilon), \dots\}$ (cf. Eq. (11.30)) als Input für das Overholt-Verfahren verwendet und mit der so extrapolierten Folge verglichen.

Als Maß für den Fehler des extrapolierten Wertes geben wir in den Tafeln den Wert der Funktion F aus Gl. (11.17) an. Dieser Wert sollte dicht bei Null liegen, da wir ja nach einer Nullstelle dieser Funktion suchen. In den Tabellen für diskrete Spektren ist auch die Polstärke des extrapolierten Wertes gemäß Gl. (11.20) angegeben.

11.2.1 Diskrete Spektren

Im Fall diskreter Spektren hat die inverse Dyson-Gleichung die Form (vgl. Gln. (11.18), (11.19), (11.17))

$$\omega = \epsilon + \sum_{i=1}^M \frac{a_i}{\omega + b_i}. \quad (11.31)$$

Als einfachen Testfall kann man $M = 2$ wählen. Dieser Wert von M wird in einer Rechnung an HeH^+ in einer minimalen Basis benötigt, wie sie im Detail im Buch von Szabo und Ostlund [345, Abschn. 7.3] als ein illustratives Beispiel diskutiert wird. Sogar in diesem Zweipolfall kann langsame Konvergenz auftreten wie in Tabelle 11.1 gezeigt.

Sogar in Fällen, wo die Konvergenz der Fixpunktiterationen schneller ist, führt die Verwendung des Overholt-Verfahrens zu einer deutlichen Konvergenzverbesserung, wie in Tabellen 11.2 und 11.3 gezeigt.

Tabelle 11.2: Diskrete Spektren ($M = 2, \epsilon = 0.2$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
5	0.43882394220272	0.39256019272400
6	0.36382754850966	0.39251500157768
7	0.41373724054133	0.39253956588696
8	0.37865803848226	0.39254072029834
9	0.40241322117594	0.39254068825580
10	0.38590637278326	0.39254068856368
11	0.39717593678654	0.39254068854342
12	0.38938771017377	0.39254068854315
13	0.39472525798161	0.39254068854315
14	0.39104613555664	0.39254068854315
15	0.39357211573944	0.39254068854315

Gl. (11.31) mit $\epsilon = 0.2, M = 2, a_1 = a_2 = 0.1, b_1 = 0, b_2 = -2$.

Fehler: $F(V_{13}^{(0)}) = 0.$,

Polstärke: $P(V_{13}^{(0)}) = 0.59252945913648$.

Tabelle 11.3: Diskrete Spektren ($M = 2, \epsilon = -1$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
3	-1.1213234822867	-1.1212275936060
4	-1.1212180235021	-1.1212267135782
5	-1.1212274940469	-1.1212267135864
6	-1.1212266434934	-1.1212267135864
7	-1.1212267198814	-1.1212267135864
8	-1.1212267130210	-1.1212267135864
9	-1.1212267136371	-1.1212267135864

Gl. (11.31) mit $\epsilon = -1, M = 2, a_1 = a_2 = 0.1, b_1 = 0, b_2 = -2$.

Fehler: $F(V_8^{(0)}) = -1.3877787807814 \cdot 10^{-16}$,

Polstärke: $P(V_8^{(0)}) = 0.91759129330767$.

In den Tabellen 11.4 und 11.5 ist $M = 10$ gewählt. Man beachte, daß in dem betrachteten Beispiel die Konvergenz relativ langsam ist, da die HF-Energie ϵ dicht an einem der Pole von $f(\omega)$ liegt. Einige der Pole von $f(\omega)$ wurden absichtlich dicht benachbart gewählt, um gegebenenfalls numerische Schwierigkeiten bei der direkten Iteration oder ihre Extrapolation aufzudecken. Zu diesem Zweck wurden die Rechnungen in zwei verschiedenen Genauigkeiten durchgeführt, nämlich in QUADRUPLE PRECISION (entsprechend 30-32

Tabelle 11.4: Diskrete Spektren ($M = 10$, $\epsilon = 3.91001$, 30-32 Stellen)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
55	7.4003154605957068373	8.3384701910462795931842734343718462
60	9.2082847763260724577	8.3384722473509295890091131284905515
65	7.7760071222293895115	8.3384722473618568128944554836000645
70	8.8161696359070212707	8.3384722473618567744775399147775924
75	8.0082181314418697200	8.3384722473618567744775230624673552
80	8.6052241022533880180	8.3384722473618567744775230624634586
85	8.1468921280763697484	8.3384722473618567744775230624606622
90	8.4888389705654434186	8.3384722473618567744775230624598009
95	8.2281070544241024081	8.3384722473618567744775230624631243
100	8.4236876329794771683	8.3384722473618567744775230624615219

Gl. (11.31) mit $\epsilon = 3.91001$, $M = 10$, $a_1 = 0.1$, $b_1 = 0$, $a_2 = 0.11$, $b_2 = -2$, $a_3 = 1.1$, $b_3 = -2.1$, $a_4 = 1.11$, $b_4 = -2.2$, $a_5 = 2.1$, $b_5 = -3.1$, $a_6 = 2.11$, $b_6 = -3.2$, $a_7 = 3.1$, $b_7 = -3.201$, $a_8 = 3.11$, $b_8 = -4.$, $a_9 = 4.1$, $b_9 = -4.04$, $a_{10} = 4.11$, $b_{10} = -4.041$.

Fehler: $F(V_{98}^{(0)}) = -2.0268486734731270117561111867763775 \cdot 10^{-30}$,

Polstärke: $P(V_{98}^{(0)}) = 0.51401680008558854497560319237979828$.

Tabelle 11.5: Diskrete Spektren ($M = 10$, $\epsilon = 3.91001$, 14-16 Stellen)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
55	7.4003138888925	8.3384701907166
60	9.2082865690098	8.3384722473576
65	7.7760061286812	8.3384722473655
70	8.8161705852427	8.3384722473638
75	8.0082175305779	8.3384722473580
80	8.6052246212724	8.3384722473611
85	8.1468917736629	8.3384722473677
90	8.4888392595856	8.3384722473607
95	8.2281068483188	8.3384722473624
100	8.4236877956289	8.3384722473686

Gl. (11.31) mit $\epsilon = 3.91001$, $M = 10$, $a_1 = 0.1$, $b_1 = 0$, $a_2 = 0.11$, $b_2 = -2$, $a_3 = 1.1$, $b_3 = -2.1$, $a_4 = 1.11$, $b_4 = -2.2$, $a_5 = 2.1$, $b_5 = -3.1$, $a_6 = 2.11$, $b_6 = -3.2$, $a_7 = 3.1$, $b_7 = -3.201$, $a_8 = 3.11$, $b_8 = -4.$, $a_9 = 4.1$, $b_9 = -4.04$, $a_{10} = 4.11$, $b_{10} = -4.041$.

Fehler: $F(V_{98}^{(0)}) = 1.3155698752598 \cdot 10^{-11}$,

Polstärke: $P(V_{98}^{(0)}) = 0.51401680008632$.

Dezimalstellen), mit Ergebnissen in Tabelle 11.4, und ebenfalls in DOUBLE PRECISION mit Resultaten in Tabelle 11.5. Auf diese Weise kann man die numerische Stabilität des Algorithmus testen. Als Ergebnis stellt man gute Übereinstimmung der entsprechenden Werte und damit Fehlen numerischer Instabilitäten des Extrapolationsverfahrens fest. Die Konvergenzverbesserung ist drastisch.

11.2.2 Tight-Binding-Modell

Tabelle 11.6: Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 8.95$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
2	8.8196464293037	8.7362303906648
4	8.8057510219372	8.8047548332261
6	8.8048191233635	8.8047542651339
8	8.8047584776799	8.8047542651341
10	8.8047545387066	8.8047542651341

Gl. (11.30) mit $\epsilon = 8.95$, $a = 3$.

Fehler: $F(V_8^{(0)}) = 1.3877787807814 \cdot 10^{-16}$.

Tabelle 11.7: Tight-Binding Modell ($\epsilon = 11.05$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
2	11.189623281403	11.714994782656
4	11.263671095950	11.291132537710
6	11.286350306990	11.294351295534
8	11.292327814905	11.294351625706
10	11.293843689909	11.294351625712

Gl. (11.30) mit $\epsilon = 11.05$, $a = 3$.

Fehler: $F(V_8^{(0)}) = -2.7755575615629 \cdot 10^{-15}$.

Wie in [126] diskutiert, hat das Modell für gegebenen Parameter a ohne Berücksichtigung von Korrelationskorrekturen zwei Bänder in den Intervallen $(-a - 2, -a)$ und $(a, a + 2)$ und demnach eine Bandlücke der Größe $2a$. Die Selbstenergie ist im Modell durch die (a abhängige) Funktion $\Omega(\omega)$ aus Gln. (11.27)–(11.29) gegeben. Diese Selbstenergie ist nicht reell in den Intervallen $(-3a - 2, -3a)$ und $(3a, 3a + 2)$, wo Schnitte in der komplexen Ebene liegen. Korrelationskorrekturen werden mit der inversen Dyson-Gleichung (11.30) berechnet. Wir wählen $a = 3$.

Für $a = 3$ ist ein Ende eines Schnittes nahe $3a = 9$. In Tabelle 11.6 wird gezeigt, daß sogar für einen Wert $\epsilon = 8.95$ nahe am Schnitt die direkte Iteration relativ schnell

Tabelle 11.8: Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 5$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
2	4.9799427349003	4.9798084456719
3	4.9799418448323	4.9799418506929
4	4.9799418507318	4.9799418506930
5	4.9799418506927	4.9799418506930
6	4.9799418506930	4.9799418506930

Gl. (11.30) mit $\epsilon = 5$, $a = 3$.

Fehler: $F(V_4^{(0)}) = -2.3939183968480 \cdot 10^{-16}$.

konvergiert. Nach zehn Iteration sind die ersten sieben Dezimalstellen des Ergebnisse korrekt. Man beachte aber, daß das Overholt-Verfahren schon nach fünf Iterationen sogar neun führende Stellen ergibt. Die Zahl der für eine bestimmte Genauigkeit benötigten Iterationen wird also durch das Extrapolationsverfahren mehr als halbiert.

Tabelle 11.9: Tight-Binding-Modell ($\epsilon = 3$)

n	s_{n-1}	$V_{n-2}^{(0)}$
1	2.9899691659779	
2	2.9900091322503	2.9899691659779
3	2.9900089731560	2.9900089737868
4	2.9900089737893	2.9900089737868
5	2.9900089737867	2.9900089737868
6	2.9900089737868	2.9900089737868

Gl. (11.30) mit $\epsilon = 3$, $a = 3$.

Fehler: $F(V_4^{(0)}) = 1.3357370765021 \cdot 10^{-16}$.

Wie in Tabelle 11.7 gezeigt, ist die Konvergenz der direkten Iteration für Werte von ϵ leicht über der oberen Grenze des Schnittes bei $3 \cdot a + 2 = 11$ sehr viel langsamer. Nach 10 Iterationen hat man erst fünf Dezimalstellen exakt erhalten. Nach der gleichen Zahl von Iterationen ist der extrapolierte Wert dagegen maschinengenau.

Für Werte von ϵ an den HF-Bandkanten bei $a = 3$ und $a + 2 = 5$ konvergiert die direkte Iteration relativ schnell, wie in Tabellen 11.8 und 11.9 gezeigt. In beiden Fällen wird nach sechs direkten Iterationen schon Maschinengenauigkeit erreicht. Aber sogar in diesen Fällen kann man — fast ohne numerischen Aufwand — die Zahl der Iterationen durch das Overholt-Verfahren drastisch reduzieren und Maschinengenauigkeit nach drei oder vier Iterationen erreichen.

Kapitel 12

Anwendung auf die Vielteilchenstörungstheorie

In diesem Kapitel sollen die in Kapitel 6 eingeführten Methoden auf die Vielteilchenstörungstheorie (MBPT, Many-Body Perturbation Theory) angewendet werden. Dieses Kapitel stützt sich auf [165].

12.1 Überblick

Vielteilchenstörungstheorie ist eine der Standardmethoden zur Berechnung der Korrelationsenergie in molekularen *ab initio* Rechnungen. Die Konvergenzbeschleunigung der Vielteilchenstörungsreihe ist ein in jüngerer Zeit verstärkt untersuchtes Thema [93, 95, 96, 94, 98, 97, 165, 307], das ebenfalls im Kontext zeitabhängiger Phänomene von Interesse ist [92].

Wir schränken unsere Untersuchungen auf Verfahren ein, die auf der Møller-Plesset(MP)-Störungstheorie [254] basieren, da die letztere routinemäßig in der Quantenchemie für Systeme mit abgeschlossenen Schalen benutzt wird. Für Systeme mit offenen Schalen wurde von Knowles, Andrews, Amos, Handy und Pople [210] das *RMP (restricted MP)-Verfahren* entwickelt, daß auf einer ROHF(restricted open-shell HF)-Bestimmung des ungestörten MP-Hamiltonoperators beruht. Auf diese Weise vermeidet der RMP-Zugang weitgehend Spinkontaminationen, die für UMP(unrestricted MP)-Verfahren charakteristische sind, die von einer UHF(unrestricted HF)-Rechnung in nullter Ordnung der Störungstheorie ausgehen.

Für kleinere Moleküle machen Berechnungen bis zur vierten oder gar fünften Ordnung der Störungstheorie keine übermäßigen Probleme und *MP_n*-Rechnungen mit $n = 2, 4$ stellen einen verbreiteten Weg zur Berechnung der Korrelationsenergie dar.

Der Rechenaufwand steigt jedoch steil mit der berücksichtigten Ordnung der Störungstheorie und mit der Größe der Moleküle bzw. Basissätze an. Daher ist es von besonderer Wichtigkeit, den Informationsinhalt der Terme niedrigerer Ordnung bestmöglich auszunutzen, da Terme höherer Ordnung schwierig zu berechnen sind.

Die termweise Aufsummation der Störungsreihe Ordnung für Ordnung gemäß

$$E^{(n)} = \sum_{j=0}^n E_j, \quad (12.1)$$

ist nicht der beste Weg, den Informationsgehalt der Terme E_j zu nutzen. Schmidt, Warken und Handy [307] haben gezeigt, daß die in Kapitel 6 besprochene Feenberg-Reihe bessere Näherungen für die Korrelationsenergie liefert.

Wir erinnern daran, daß die Feenberg-Reihe einen Spezialfall der Geometrischen Approximation [6, 31, 308, 393] darstellt und der Wahl $\alpha = E_3/E_2$ für alle Feenberg-Energien F_n auf der Grundlage der Renormierung $H_0 \rightarrow (1 - \alpha)H_0$ des ungestörten Hamilton-Operators entspricht. Für die Goldhammer-Feenberg-Energien GF_n verwendet man dagegen für jedes n unterschiedliche Werte von α .

Als Alternative kann man Padé-Approximationen aus Gl. (2.34) verwenden, die rationale Approximationen $[p/q]$ für die Störungsreihe (6.28) liefern. Padé-Approximationen kann man auch auf der Basis der mittels Feenberg-Skalierung renormierten Störungsreihe (6.6) berechnen. Wie von Wilson, Silver und Farrell [393] gezeigt, haben die speziellen Padé-Approximationen $[n + 1/n]$ die Eigenschaft, daß sie invariant unter der Feenberg-Skalierung sind, also für die ursprüngliche und die renormierte Störungsreihe übereinstimmen. Diese Invarianz ist eine wichtige Eigenschaft für MBPT-Näherungsverfahren zur Berechnung der Korrelationsenergie, da die wahre Korrelationsenergie von unserer Wahl des ungestörten Hamilton-Operators unabhängig ist.

Wir bemerken, daß mitunter auch etwas andere Ausdrücke als Padé-Approximationen bezeichnet werden, die auf der Grundlage anderer Potenzreihen berechnet werden [212]. Für die Anwendung rationaler Approximationen auf die MP-Reihe siehe auch Ref. [152].

Man kann ferner die Methode der effektiven charakteristischen Polynome [42, 43, 44, 45, 77, 79, 101, 346] verwenden, die ebenfalls in Kapitel 6 besprochen wurde. Wie wir in Gl. (6.33) gesehen haben, hat die Näherung Π_2 die vorteilhafte Eigenschaft, invariant unter der Feenberg-Skalierung zu sein.

Ein wichtiges Kriterium für den Vergleich von Näherungsmethoden ist die Frage, ob ein Verfahren die richtige Abhängigkeit von der Systemgröße liefert, ob es also *size-extensive* ist. Dies bedeutet, daß für ein Supermolekül aus N wechselwirkungsfreien identischen Systemen die korrekte Energie proportional zu N sein muß. Es ist wohlbekannt (siehe beispielsweise [181, 213]), daß Rayleigh-Schrödinger MBPT Ordnung für Ordnung diese Eigenschaft besitzt. Ist also E_j der j -te Term der Störungsreihe eines der N Subsysteme, so ist der j -te Term der Störungsreihe für das Supermolekül NE_j . Dies hat zur Folge, daß aufgrund der Gleichungen (6.24), (6.25) und (6.34) die Feenberg-Energien F_n , die Goldhammer-Feenberg-Energien GF_n und die Π_2 -Näherung auf der Grundlage der effektiven charakteristischen Polynome ebenfalls *size-extensive* sind.

Alle diese Methoden erfordern nur die Terme E_i der Møller-Plesset-Störungsreihe. Der Zusatzaufwand für ihre Berechnung neben den üblichen Näherung MP_n , $n = 3, 4, 5$ ist vernachlässigbar. Im folgenden werden numerische Resultate vorgestellt, die zeigen, daß man mit diesen Verfahren in vielen Fällen wesentlich verbesserte Näherungen für die Korrelationsenergie erhalten kann.

Trotzdem stellt sich die Frage, wann man diese Verfahren verwenden darf, da die Vielteilchenstörungstheorie mit eindimensionalem Referenzraum bekanntlich für große Abweichungen von den Gleichgewichtsgeometrien unzuverlässig wird, und wann man vom Rechenaufwand aufwendigere Verfahren [20, 21, 76, 93, 95, 96, 94, 98, 97, 128, 151, 157, 181, 179, 180, 187, 204, 213, 247, 248, 258, 272, 273, 274, 275, 297, 298, 303, 307, 315, 338, 345, 392] verwenden muß.

Ein praktisch leicht anwendbares Kriterium zur Beantwortung dieser Frage wurde vom Autor vorgeschlagen [165]. Es beruht auf der für viele Testfälle gültigen Beobachtung, daß kleine Abweichungen der Feenberg-, Goldhammer-Feenberg-, Padé- und Π_2 -Näherungen untereinander normalerweise mit der guten Qualität dieser Näherungen verknüpft ist. Streuen die Näherungswerte also stark, muß man in jedem Fall auf die aufwendigeren Verfahren zurückgreifen. Kleine Streuungen deuten dagegen normalerweise darauf hin, daß den erhaltenen Näherungen für die Korrelationsenergie vertrauen kann.

12.2 Numerische Resultate

Glücklicherweise stehen hervorragende Daten für den Test der Methoden aus dem voranstehenden Abschnitt in einer Arbeit von Schmidt, Warken und Handy [307] zur Verfügung. Diese Datensammlung enthält auch Ergebnisse einer Arbeit von Kucharski, Noga und Bartlett [212]. In diesen Arbeiten sind eine große Zahl von Møller-Plesset-Resultaten bis zur fünften Ordnung sowie zum Vergleich FCI(Full Configuration Interaction)- oder CCSDT(Coupled Cluster Singles Doubles Triples)-Resultate für die Grundzustandsenergien einer Reihe von kleinen Systemen (BH, HF, CH₂, H₂O, NH₂, NH₃, CO, C₂H₂, O₃, CN) zu finden. Auf diese Daten wurden die oben erwähnten Methoden zur Berechnung der Korrelationsenergie angewandt. Die Resultate findet man in in Tabelle 12.1. Energien sind in Hartree. %Korr bedeutet Korrelationsenergie in Prozent. Der Vollständigkeit halber sind auch die MP-Ergebnisse mit angegeben. Wenn nicht anders angegeben, bedeutet MP_n die Verwendung von RMP_n für Systeme mit offenen Schalen. Abgesehen vom Fall n (NH₃) entspricht die linke Hälfte der Angaben in Tabelle 12.1 Störungstheorie bis zur vierten Ordnung, während die Daten in der rechten Hälfte auch von MP₅-Ergebnissen abhängen.

Man sieht, daß in vielen Fällen die neuen Näherungsverfahren exzellente Resultate für die Korrelationsenergie liefern. Problematische Fälle sind s, t und u. Dafür gibt es allerdings physikalisch einleuchtende Begründungen. Im Fall s, der einer Rechnung an CN entspricht, ist die Störungsreihe divergent. Der Grund ist, daß die Störungsreihe auf doppelt besetzten ROHF-Orbitalen basiert, im Gegensatz zu RMP-Rechnungen, bei denen die besetzten α - und β -Orbitale jeweils unterschiedlich rotiert werden. [151, 307] In den Fällen t und u, die Rechnungen an H₂O in einer gestreckten Geometrie entsprechen, handelt es sich um eine UMP-Störungsreihe, die monoton und aufgrund von Spinkontaminationen sehr langsam konvergiert. [152, 307]

Tabelle 12.1: Vergleich von Verfahren zur Berechnung der Korrelationsenergie

Method	Energie	%Korr	Method	Energie	%Korr
Fall a: BH ($^1\Sigma$, $r = 2.329 a_0$, DZP, [212, 153, 22])					
SCF	-25.125260	0.00	MP5	-25.225101	97.53
MP2	-25.198988	72.02	F5	-25.226881	99.27
MP3	-25.216566	89.19	GF5	-25.226971	99.36
MP4	-25.222567	95.06	GF5b	-25.227088	99.47
F4	-25.226167	98.57	[3/2]	-25.227299	99.68
[2/2]	-25.225294	97.72	[2/3]	-25.227478	99.85
Π2	-25.226555	98.95	FCI	-25.227627	100.00
Fall b: BH ($^1\Sigma$, $r = 1.5 \times 2.329 a_0$, DZP, [212, 264])					
SCF	-25.062213	0.00	MP5	-25.172372	96.83
MP2	-25.139869	68.26	F5	-25.174484	98.69
MP3	-25.160249	86.18	GF5	-25.174544	98.74
MP4	-25.168745	93.64	GF5b	-25.177010	100.91
F4	-25.175345	99.45	[3/2]	-25.175078	99.21
[2/2]	-25.173623	97.93	[2/3]	-25.175106	99.24
Π2	-25.176791	100.72	FCI	-25.175976	100.00
Fall c: BH ($^1\Sigma$, $r = 2 \times 2.329 a_0$, DZP, [212, 264])					
SCF	-24.988201	0.00	MP5	-25.121278	95.65
MP2	-25.074503	62.03	F5	-25.126844	99.65
MP3	-25.100221	80.51	GF5	-25.126983	99.75
MP4	-25.114005	90.42	GF5b	-25.130104	101.99
F4	-25.128829	101.08	[3/2]	-25.129407	101.49
[2/2]	-25.124953	98.29	[2/3]	-25.129475	101.54
Π2	-25.137084	107.01	FCI	-25.127333	100.00
Fall d: HF ($r = 1.733 a_0$, DZP, [212, 25])					
SCF	-100.047087	0.00	MP5	-100.250158	99.60
MP2	-100.243165	96.17	F5	-100.250099	99.57
MP3	-100.245531	97.33	GF5	-100.250276	99.66
MP4	-100.251232	100.13	GF5b	-100.251988	100.50
F4	-100.251443	100.23	[3/2]	-100.250468	99.75
[2/2]	-100.251547	100.28	[2/3]	-100.250481	99.76
Π2	-100.251820	100.42	FCI	-100.250969	100.00
Fall e: HF ($r = 1.5 \times 1.733 a_0$, DZP, [212, 25])					

(Tabelle 12.1 – Fortsetzung)

SCF	-99.933230	0.00	MP5	-100.158121	99.00
MP2	-100.149756	95.32	F5	-100.158152	99.01
MP3	-100.148543	94.78	GF5	-100.158247	99.05
MP4	-100.159627	99.66	GF5b	-100.161609	100.53
F4	-100.159443	99.58	[3/2]	-100.158750	99.28
[2/2]	-100.160091	99.87	[2/3]	-100.158757	99.28
Π_2	-100.160708	100.14	FCI	-100.160395	100.00
Fall f: HF ($r = 2 \times 1.733 a_0$, DZP, [212, 25])					
SCF	-99.817571	0.00	MP5	-100.073004	96.93
MP2	-100.057062	90.88	F5	-100.073139	96.98
MP3	-100.054148	89.77	GF5	-100.073301	97.04
MP4	-100.076267	98.16	GF5b	-100.079678	99.46
F4	-100.075480	97.86	[3/2]	-100.075064	97.71
[2/2]	-100.077899	98.78	[2/3]	-100.075072	97.71
Π_2	-100.080476	99.76	FCI	-100.081107	100.00
Fall g: CH ₂ (1A_1 , $r = 2.11 a_0$, $\theta = 102.4^\circ$, DZP, [212, 27])					
SCF	-38.886297	0.00	MP5	-39.024234	97.91
MP2	-38.996127	77.96	F5	-39.025336	98.69
MP3	-39.016593	92.48	GF5	-39.025450	98.77
MP4	-39.022203	96.47	GF5b	-39.025413	98.74
F4	-39.024615	98.18	[3/2]	-39.025674	98.93
[2/2]	-39.024049	97.78	[2/3]	-39.025895	99.09
Π_2	-39.024791	98.30	FCI	-39.027183	100.00
Fall h: H ₂ O (1A_1 , $r = 1.88973 a_0$, $\theta = 104.5^\circ$, DZP, [212, 26])					
SCF	-76.040542	0.00	MP5	-76.255924	99.68
MP2	-76.243660	94.00	F5	-76.255918	99.67
MP3	-76.249403	96.66	GF5	-76.255929	99.68
MP4	-76.255706	99.58	GF5b	-76.257338	100.33
F4	-76.256262	99.83	[3/2]	-76.256134	99.77
[2/2]	-76.256282	99.84	[2/3]	-76.256135	99.77
Π_2	-76.256729	100.05	FCI	-76.256624	100.00
Fall i: H ₂ O (1A_1 , $r = 1.5 \times 1.88973 a_0$, $\theta = 104.5^\circ$, DZP, [212, 26])					
SCF	-75.800494	0.00	MP5	-76.066422	98.16
MP2	-76.048095	91.40	F5	-76.066368	98.14

(Tabelle 12.1 – Fortsetzung)

MP3	-76.045081	90.28	GF5	-76.066442	98.17
MP4	-76.065641	97.87	GF5b	-76.068395	98.89
F4	-76.064909	97.60	[3/2]	-76.068528	98.94
[2/2]	-76.066937	98.35	[2/3]	-76.068533	98.94
Π2	-76.068954	99.10	FCI	-76.071405	100.00
Fall j: H ₂ O (¹ A ₁ , $r = 2 \times 1.88973 a_0$, $\theta = 104.5^\circ$, DZP, [212, 26])					
SCF	-75.582286	0.00	MP5	-75.935304	95.41
MP2	-75.898603	85.50	F5	-75.934525	95.20
MP3	-75.877664	79.84	GF5	-75.935353	95.43
MP4	-75.937410	95.98	GF5b	-75.923566	92.24
F4	-75.927115	93.20	[3/2]	-75.949379	99.22
[2/2]	-75.941045	96.97	[2/3]	-75.949401	99.22
Π2	-75.954930	100.72	FCI	-75.952269	100.00
Fall k: NH ₂ (² B ₁ , $r = 1.013 \text{ \AA}$, $\theta = 103.2^\circ$, 6-31G, [152, 210])					
SCF	-55.530177	0.00	MP5	-55.632426	99.18
MP2	-55.617272	84.48	F5	-55.632818	99.56
MP3	-55.627501	94.40	GF5	-55.632834	99.57
MP4	-55.631220	98.01	GF5b	-55.633280	100.00
F4	-55.632525	99.27	[3/2]	-55.633011	99.74
[2/2]	-55.632204	98.96	[2/3]	-55.633022	99.75
Π2	-55.632825	99.56	FCI	-55.633276	100.00
Fall l: NH ₂ (² B ₁ , $r = 1.5 \times 1.013 \text{ \AA}$, $\theta = 103.2^\circ$, 6-31G, [152, 210])					
SCF	-55.367729	0.00	MP5	-55.520522	96.14
MP2	-55.489967	76.91	F5	-55.521721	96.89
MP3	-55.504270	85.91	GF5	-55.521724	96.90
MP4	-55.516470	93.59	GF5b	-55.523319	97.90
F4	-55.521456	96.73	[3/2]	-55.523696	98.14
[2/2]	-55.521125	96.52	[2/3]	-55.523706	98.14
Π2	-55.526202	99.71	FCI	-55.526658	100.00
Fall m: NH ₂ (² B ₁ , $r = 2 \times 1.013 \text{ \AA}$, $\theta = 103.2^\circ$, 6-31G, [152, 210])					
SCF	-55.181593	0.00	MP5	-55.418215	91.36
MP2	-55.357617	67.96	F5	-55.420149	92.11
MP3	-55.375463	74.85	GF5	-55.420173	92.12
MP4	-55.409165	87.87	GF5b	-55.412429	89.13

(Tabelle 12.1 – Fortsetzung)

F4	-55.421427	92.60	[3/2]	-55.432093	96.72
[2/2]	-55.426946	94.73	[2/3]	-55.432101	96.72
Π 2	-55.478348	114.58	FCI	-55.440593	100.00
Fall n: NH_3 ($r = 1.91165 a_0$, $\theta = 106.7^\circ$, DZ, [153, 22])					
SCF	-56.165931	0.00	F4	-56.291937	99.47
MP2	-56.277352	87.95	[2/2]	-56.291782	99.35
MP3	-56.285281	94.21	Π 2	-56.292636	100.02
MP4	-56.290692	98.48	FCI	-56.292612	100.00
Fall o: CO ($^1\Sigma$, DZ, [212])					
SCF	-112.760093	0.00	MP5	-113.059117	98.36
MP2	-113.045824	93.99	F5	-113.059254	98.41
MP3	-113.044659	93.61	GF5	-113.060859	98.93
MP4	-113.067749	101.20	GF5b	-113.073579	103.12
F4	-113.067469	101.11	[3/2]	-113.062479	99.47
[2/2]	-113.069566	101.80	[2/3]	-113.062539	99.49
Π 2	-113.072074	102.62	CCSDT	-113.064100	100.00
Fall p: C_2H_2 ($^1\Sigma_g$, DZP, [212])					
SCF	-76.831819	0.00	MP5	-77.118892	102.18
MP2	-77.085307	90.23	F5	-77.120192	102.65
MP3	-77.097232	94.47	GF5	-77.122141	103.34
MP4	-77.111732	99.63	GF5b	-77.117205	101.58
F4	-77.113928	100.42	[3/2]	-77.127079	105.10
[2/2]	-77.114110	100.48	[2/3]	-77.127731	105.33
Π 2	-77.116235	101.24	CCSDT	-77.112760	100.00
Fall q: O_3 (1A_1 , DZP, [212])					
SCF	-224.295920	0.00	MP5	-224.929902	97.54
MP2	-224.931924	97.86	F5	-224.933812	98.15
MP3	-224.888104	91.11	GF5	-224.934513	98.25
MP4	-224.952784	101.07	GF5b	-224.952167	100.97
F4	-224.941418	99.32	[3/2]	-224.938301	98.84
[2/2]	-224.950280	100.68	[2/3]	-224.938367	98.85
Π 2	-224.952387	101.00	CCSDT	-224.945859	100.00
Fall r: CN ($^2\Sigma$, $r = 1.1619 \text{ \AA}$, STO-3G, RMP [210])					
SCF	-90.99752	0.00	MP5	-91.16157	95.07

(Tabelle 12.1 – Fortsetzung)

MP2	-91.15437	90.90	F5	-91.16165	95.12
MP3	-91.14799	87.20	GF5	-91.16166	95.12
MP4	-91.16300	95.90	GF5b	-91.16360	96.24
F4	-91.16133	94.93	[3/2]	-91.16297	95.88
[2/2]	-91.16321	96.02	[2/3]	-91.16297	95.88
Π2	-91.16426	96.63	FCI	-91.17008	100.00
Fall s: CN ($^2\Sigma$, $r = 1.1619 \text{ \AA}$, STO-3G, Hubac-Carsky, [151, 182])					
SCF	-90.99752	0.00	MP5	-91.12039	71.20
MP2	-91.17762	104.37	F5	-91.15212	89.59
MP3	-91.14160	83.50	GF5	-91.15998	94.15
MP4	-91.19422	113.99	GF5b	-91.18190	106.85
F4	-91.17389	102.21	[3/2]	-91.16350	96.19
[2/2]	-91.18753	110.11	[2/3]	-91.16359	96.24
Π2	-91.19152	112.42	FCI	-91.17008	100.00
Fall t: H ₂ O ($r = 1.5 \times 0.967 \text{ \AA}$, $\theta = 107.6^\circ$, 6-21G,[152])					
RHF	-75.707206	0.00	UMP5	-75.853895	76.41
UHF	-75.735012	14.48	F5	-75.855560	77.28
UMP2	-75.829388	63.65	GF5	-75.856608	77.82
UMP3	-75.836823	67.52	GF5b	-75.850870	74.84
UMP4	-75.848211	73.45	[3/2]	-75.862349	80.81
F4	-75.851276	75.05	[2/3]	-75.862421	80.85
[2/2]	-75.851994	75.42	FCI	-75.899180	100.00
Π2	-75.857074	78.07			
Fall u: H ₂ O ($r = 2 \times 0.967 \text{ \AA}$, $\theta = 107.6^\circ$, 6-21G,[152])					
RHF	-75.491406	0.00	UMP5	-75.763370	90.72
UHF	-75.699298	69.35	F5	-75.763704	90.83
UMP2	-75.754669	87.82	GF5	-75.763826	90.88
UMP3	-75.760219	89.67	GF5b	-75.763657	90.82
UMP4	-75.762422	90.41	[3/2]	-75.764089	90.96
F4	-75.763098	90.63	[2/3]	-75.764104	90.97
[2/2]	-75.762941	90.58	FCI	-75.791180	100.00
Π2	-75.763281	90.69			

Energien in Hartree. %Korr: Korrelationsenergie in Prozent

Abgesehen von diesen problematischen Fällen erkennt man, daß Fall m, der einer

Rechnung an NH_2 bei doppelten Gleichgewichtsabständen entspricht, relativ hohe Fehler aufweist. Schließt man diesen Fall ebenfalls aus, so kann man das Abschneiden der verschiedenen Verfahren zur Berechnung der Korrelationsenergie statistisch bewerten, wie in Tabelle 12.2 gezeigt. Angegeben sind jeweils der maximale Fehler, der mittlere absolute Fehler, der mittlere quadratische Fehler (rms, root mean square) und der mittlere Prozentsatz der erhaltenen Korrelationsenergie. In den Fällen o, p und q, die Rechnungen an den Molekülen CO , C_2H_2 bzw. O_3 entsprechen, stand kein FCI-Vergleichswert zur Verfügung. In diesen Fällen wurden die CCSDT-Ergebnisse zur Berechnung der Korrelationsenergie herangezogen, weshalb die Werte für die Korrelationsenergien mit Vorsicht zu bewerten sind. Um daraus resultierende systematische Fehler zu vermeiden, wurde der statistische Vergleich einmal unter Ausschluß dieser Fälle und einmal unter ihrem Einschluß vorgenommen. Als Ergebnis kann man festhalten, daß sorgfältig ausgewählte Methoden auf der Grundlage der Störungstheorie bis zur vierten Ordnung — wie das Π_2 -Verfahren — durchaus mit Methoden auf der Basis der fünften Ordnung mithalten können. Was diese Methoden betrifft, so ist die Goldhammer-Feenberg-Energie GF5 der Feenberg-Energie F5 stets leicht überlegen, und die Näherung GF5b liefert erstaunlich gute Ergebnisse, obwohl man sie nicht direkt als eine Sattelpunktmethode klassifizieren kann. Bei den Padé-Approximationen schneidet die $[3/2]$ -Approximation (die invariant unter Feenberg-Skalierung ist) ziemlich erfolgreich ab, während die $[2/3]$ -Approximation sich sehr ähnlich verhält. Andere Padé-Approximationen (die nicht in Tabelle 12.1 angegeben sind), sind den angegebenen Varianten bei Anwendung auf die gleichen Daten unterlegen.

Eine sorgfältige Analyse der Daten in Tabelle 12.1 führt zum Schluß, daß die näherungsweise Berechnung der Korrelationsenergie auf der Grundlage der MP-MBPT um so besser ist, je mehr man sich der Gleichgewichtsgeometrie des jeweiligen Moleküls nähert. Das ist insofern nicht überraschend, als sich — wie oben angesprochen — die Qualität der MP-Störungsreihe mit zunehmenden Auslenkungen aus den Gleichgewichtspositionen verschlechtert. Man vergleiche zum Beispiel die Tripel der Fälle (a,b,c) für BH, (d,e,f) für HF, (h,i,j) für H_2O sowie (k,l,m) für NH_2 , bei denen sich die jeweiligen Abstände wie 1:1.5:2 verhalten. Die Werte bei Auslenkungen aus dem Gleichgewicht können vernünftig sein, müssen es aber nicht. Die Daten deuten allerdings deutlich darauf hin, daß die berechneten Korrelationsenergien dann vertrauenswürdig sind, wenn — wie in den Fällen f für HF bei $2 \times r_e$ und i für H_2O bei $1.5 \times r_e$ — die Werte von Π_2 , F4 und $[2, 2]$ nicht viel voneinander abweichen. In dieser Situation scheint die Π_2 -Methode die besten Resultate zu liefern. Andererseits sind große Differenzen zwischen den Energien Π_2 , F4 und $[2, 2]$ — wie in den Fällen j für H_2O bei $2 \times r_e$ und m für NH_2 bei $2 \times r_e$ — ein klares Zeichen dafür, daß in diesen Fällen ausgefeiltere, aufwendigere Methoden verwendet werden müssen (zum Beispiel die Λ -Transformation [93, 95, 96, 94, 98, 97, 307] oder Multi-Referenz-Verfahren [181, 187, 228, 259, 338, 360, 388]), um verlässliche Resultate zu erhalten. Ähnliches gilt für die Methoden, die auch MP5-Energien berücksichtigen.

In den Tabellen 12.3 und 12.4 werden die Verfahren benutzt, um die Dissoziationsbarriere für $\text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$ sowie die Barrierenhöhe und Reaktionswärme für $\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \rightarrow \text{C}_3\text{H}_7$ zu berechnen.

In beiden Fällen stützt sich die Rechnung auf bekannte MP-Energien bis zur vierten

Tabelle 12.2: Statistischer Vergleich verschiedener Verfahren zur Korrelationsenergieberechnung

Methode	max $ Fehler $	mittl. $ Fehler $	rms $ Fehler $	mittl. %Korr
Auswertung von 14 Fällen (a-l,n,r)				
F4	0.02515	0.00433	0.00767	98.3
[2/2]	0.01122	0.00319	0.00433	98.3
$\Pi 2$	0.00975	0.00199	0.00329	100.1
Auswertung von 17 Fällen (a-l,n-r)				
F4	0.02515	0.00409	0.00710	98.6
[2/2]	0.01122	0.00329	0.00430	98.8
$\Pi 2$	0.00975	0.00269	0.00398	100.3
Auswertung von 13 Fällen (a-l,r)				
F5	0.01774	0.00407	0.00628	98.2
GF5	0.01692	0.00394	0.00607	98.2
GF5b	0.02870	0.00400	0.00834	99.0
[3/2]	0.00711	0.00228	0.00308	99.1
[2/3]	0.00711	0.00224	0.00307	99.1
Auswertung von 16 Fällen (a-l,o-r)				
F5	0.01774	0.00483	0.00678	98.5
GF5	0.01692	0.00470	0.00664	98.6
GF5b	0.02870	0.00452	0.00811	99.6
[3/2]	0.01432	0.00332	0.00492	99.4
[2/3]	0.01497	0.00332	0.00503	99.5

Ordnung [307, Tab. 2-4]. Die Resultate zeigen, daß verlässliche Näherungen für die Korrelationsenergie, wie sie die Feenberg-Energie [307], die Padé-Approximation [2/2] und das $\Pi 2$ -Verfahren liefern, zu guter Übereinstimmung mit dem Experiment führen. Das $\Pi 2$ -Verfahren liefert in beiden Fällen die besten Resultate.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß die Verfügbarkeit verschiedener Verfahren auf der Grundlage der (R)MP-Energien in vielen Fällen eine genaue Berechnung der Korrelationsenergie bei vernachlässigbaren Zusatzkosten erlaubt. Weiterhin sind größere Abweichungen der Ergebnisse untereinander ein klarer Hinweis, wann weitere Untersuchungen notwendig sind.

Schließlich sei bemerkt, daß sich die vorliegenden Verfahren wahrscheinlich auch für die Beschleunigung von Störungsreihen im Multireferenzfalle als nützlich erweisen könnten. Dies ist eine vielversprechende Fragestellung für weitere Untersuchungen.

Tabelle 12.3: Dissoziationsbarriere (kJ/mol) für $\text{H}_2\text{CO} \longrightarrow \text{H}_2 + \text{CO}$ mit einer TZ2P-Basis bei MP2-Geometrien^a

Methode	Minimum	Übergangszustand	Barriere	Ref.
SCF	-113.912879	-113.748693	431.1	[307]
MP2	-114.329202	-114.182435	385.3	[307]
MP3	-114.334186	-114.185375	390.7	[307]
MP4	-114.359894	-114.219892	367.6	[307]
F4	-114.360838	-114.220603	368.2	[307]
[2/2]	-114.362267	-114.223409	364.6	Diese Arbeit
Π2	-114.364840	-114.227767	359.9	Diese Arbeit
BS ^b			360	[107]

^a [307]^b Beste Schätzung [107]Tabelle 12.4: Barrierenhöhe und Reaktionswärme (kJ/mol) für $\text{CH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4 \longrightarrow \text{C}_3\text{H}_7$ mit einer 6-31G*-Basis^a

Methode	Reaktanden	ÜZ ^b	Produkt	Barriere	RW ^c
RHF	-117.585674	-117.553736	-117.626572	83.8	-107.4
RMP2	-117.967150	-117.952092	-118.014126	39.5	-123.3
RMP3	-118.004259	-117.986543	-118.049999	46.5	-120.1
RMP4	-118.022888	-118.008072	-118.066816	38.9	-115.3
F4	-118.028674	-118.014137	-118.071720	38.2	-113.0
[2/2]	-118.027529	-118.013226	-118.070703	37.6	-113.3
Π2	-118.030923	-118.017302	-118.073432	35.8	-111.6
exp. ^d				33.1	-107

^a [307]^b Übergangszustand^c Reaktionswärme^d [206, 71, 307]

Kapitel 13

Zur Lösung der Ornstein-Zernike-Gleichung

In diesem Kapitel soll die Anwendung von Extrapolationsverfahren auf die Lösung der grundlegenden Gleichung für die Paarverteilungsfunktion klassischer Vielteilchensysteme, die sogenannte *Ornstein-Zernike-Gleichung* (OZ) diskutiert werden. Die Darstellung stützt sich auf eine Arbeit von Homeier, Rast und Krienke [169].

13.1 Physikalischer Hintergrund

Die thermodynamischen Eigenschaften von klassischen Vielteilchensystemen werden von den Wechselwirkungen dieser Teilchen untereinander bestimmt. Wenn man die Zweiteilchenverteilungsfunktion g kennt, kann man alle thermodynamischen Eigenschaften des jeweils betrachteten Systems berechnen. Diese Funktion ist im kanonischen Ensemble durch [127, Kap. 4]

$$g(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V^2 \frac{\int e^{-\beta U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)} d\tau(\vec{r}_3) \dots d\tau(\vec{r}_n)}{\int e^{-\beta U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)} d\tau(\vec{r}_1) \dots d\tau(\vec{r}_n)}, \quad (13.1)$$

definiert. Hierbei ist V das Volumen des Systems, n ist die Teilchenzahl und $\beta = (k_B T)^{-1}$, wobei k_B die Boltzmann-Konstante und T die absolute Temperatur ist.

Wir beschränken uns hier auf Paarpotentiale u , und damit auf eine potentielle Energie U der Form

$$U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) = \sum_{i < j}^n u(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \quad (13.2)$$

Der Einfachheit halber betrachten wir auch nur Systeme mit radialsymmetrischen Wechselwirkungen zwischen identischen Teilchen. Für die theoretische Beschreibung (siehe z.B. [127, Kap. 6, 7]) ist es nützlich, die Mayer-Funktion f über

$$f(r) = \exp(-\beta u(r)) - 1, \quad (13.3)$$

einzuführen, die von der potentiellen Energie $u(r)$ zweier Teilchen im Abstand r abhängt. Dieses Paarpotential nennt man *regulär* oder *kurzreichweitig* (vgl. [302, S. 72]), wenn es von unten beschränkt ist und

$$\int |\exp(-\beta u(r)) - 1| d\tau(\vec{r}) < \infty \quad \forall \quad \beta > 0 \quad (13.4)$$

erfüllt. Von diesem Typ sind das Lennard-Jones(LJ)-Potential

$$u(r) = 4 \cdot \varepsilon \cdot \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right), \quad (13.5)$$

mit einem Abstandsparameter σ und einer Potentialtiefe ε als Parameter. Ebenfalls kurzreichweitig ist das Hartkugelpotential

$$u(r) = \begin{cases} \infty & \forall \quad r < \sigma \\ 0 & \forall \quad r \geq \sigma \end{cases}. \quad (13.6)$$

Andererseits gibt es Paarpotentiale $u(r)$, die die Relation (13.4) nicht erfüllen. Nichtsdestoweniger geben auch sie Anlaß zu thermodynamischem Verhalten von Systemen, deren Teilchen über solche Paarpotentiale miteinander wechselwirken. Ein berühmtes Beispiel ist das klassische Einkomponentenplasma (*one-component plasma*, *OCP*) mit dem Paarpotential

$$u(r) = \Gamma_p k_B T \frac{a}{r}, \quad \Gamma_p = \frac{(Ze_0)^2}{4\pi\epsilon_r\epsilon_0 k_B T a}, \quad a = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{1/3} \quad (13.7)$$

zwischen Teilchen der Ladung Z in einem neutralisierenden Hintergrund. Hierbei ist e_0 der absolute Wert der Elementarladung, ϵ_0 ist die Dielektrizitätskonstante im Vakuum, ϵ_r ist die relative Permittivität und ρ ist die mittlere Teilchendichte, die man auch benutzen kann, um eine Längeneinheit wie angegeben zu definieren. Der Plasmaparameter Γ_p ist eine dimensionslose Größe. Für die weiteren Überlegungen zerlegen wir dann das Potential in einen langreichweitigen Anteil $u^{(l)}(r)$ und einen kurzreichweitigen Anteil $u^{(s)}(r)$ in der folgenden Weise, die auf Ng [260] zurückgeht:

$$u^{(l)}(r) = \Gamma_p k_B T \frac{a}{r} \operatorname{erf}(\alpha r), \quad u^{(s)}(r) = u(r) - u^{(l)}(r). \quad (13.8)$$

Hierbei ist α ein frei wählbarer Parameter, der üblicherweise als $\alpha = 1.08/a$ gewählt wird [260]. Für die Definition der Fehlerfunktion $\operatorname{erf}(x)$ vergleiche man [2, Kap. 7]. Die Fourier-Transformierte von $u^{(l)}(r)$ kann — ähnlich zur Fourier-Transformierten des Coulomb-Potentials — im Distributionssinne berechnet werden. Man erhält den kurzreichweitigen Ausdruck

$$\tilde{u}^{(l)}(k) = 4\pi\Gamma_p k_B T \frac{a}{k^2} \exp\left(-\frac{k^2}{4\alpha^2}\right). \quad (13.9)$$

Ist das Potential u radialsymmetrisch und damit nur eine Funktion von $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, dann ist auch die Paarverteilungsfunktion g eine Funktion von r . Um diese Größe zu bestimmen, benutzen wir die Ornstein-Zernike(OZ)-Gleichung [127]:

$$h = c + \rho \cdot c * h, \quad (13.10)$$

in der $*$ eine Faltung bezeichnet, die durch

$$[f * g](\vec{r}) = \int f(\vec{r} - \vec{r}')g(\vec{r}') d\tau(\vec{r}') \quad (13.11)$$

definiert ist. Die Dichte ρ ist dann die mittlere Teilchenzahldichte. Die Funktion $h(r) = g(r) - 1$ wird als *totale Korrelationsfunktion* bezeichnet, die Funktion $c(r)$ als *direkte Korrelationsfunktion*. Man beachte, daß die Faltung zweier radialsymmetrischer Funktionen ebenfalls eine radialsymmetrische Funktion ist. Für die Bestimmung der beiden unbekannt Funktionen h und c benötigen wir eine zweite Gleichung, die der *Abschluß* der OZ-Gleichung genannt wird und allgemein die Form [127]

$$g(r) = \exp(-\beta u(r) + h(r) - c(r) + E(r)) \quad (13.12)$$

besitzt. Hier ist E eine unendliche Reihe über sogenannte *Brückengraphen*, deren Beiträge man im Prinzip als komplizierte mehrdimensionale Integrale berechnen kann. Diese Rechnung ist sehr aufwendig. Daher benutzt man in der Praxis meist verschiedene einfache Näherungen. $E(r) = 0$ ist die *HyperNetted Chain*(HNC)-Abschlußnäherung [127], $E(r) = \ln(1 + h(r) - c(r)) - h(r) + c(r)$ ist die Percus-Yevick(PY)-Näherung [127]. Für harte Kugeln haben Labík und Malijevský(LM) eine semiempirische Näherung für E eingeführt [235], die numerische Resultate von Monte-Carlo-Rechnungen exzellent beschreibt. Es gibt noch andere Näherungen wie der sehr erfolgreichen Abschluß von Martynov und Sarkisov (MS) [237], wobei $E(r) = \sqrt{1 + 2(h(r) - c(r))} - h(r) + c(r) - 1$ gilt. Die programmtechnische Berücksichtigung der verschiedenen Abschlußrelationen wird unten genauer behandelt.

Zusammen mit der Abschlußrelation ist die OZ-Gleichung eine nichtlineare Integralgleichung, die man normalerweise nur numerisch lösen kann. Für harte Kugeln in der PY-Näherung gibt es allerdings auch ein analytische Lösung [355, 389].

13.2 Ein Algorithmus für Direkte Iteration

Der einfachste Algorithmus zur Lösung der OZ-Gleichung in Verbindung mit einem gegebenen Abschluß ist die direkte Iteration unter Verwendung der Fast-Fourier-Transformation (FFT). Aufgrund des Faltungstheorems der Fourier-Transformation ergeben sich die folgenden Gleichungen im \vec{k} -Raum:

$$\tilde{h}(k) = \tilde{c}(k) + \rho \cdot \tilde{c}(k) \cdot \tilde{h}(k), \quad k = |\vec{k}|. \quad (13.13)$$

Die Fourier-Transformierten sind dabei im radialsymmetrischen Falle durch Fourier-Bessel-Transformation gegeben und lauten für jede Funktion $f(r)$

$$\tilde{f}(k) = 4\pi \cdot \int_0^\infty f(r) \frac{\sin(kr)}{kr} r^2 dr, \quad f(r) = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \int_0^\infty \tilde{f}(k) \frac{\sin(kr)}{kr} k^2 dk. \quad (13.14)$$

Führt man $F(r) = f(r) \cdot r$ und $\tilde{F}(k) = k \cdot \tilde{f}(k)$ für $f = c, h$ ein, so erhält man eine Fourier-Sinus-Transformation

$$\tilde{F}(k) = 4\pi \cdot \int_0^{\infty} F(r) \sin(kr) dr, \quad F(r) = \frac{1}{2\pi^2} \cdot \int_0^{\infty} \tilde{F}(k) \sin(kr) dk. \quad (13.15)$$

Multiplikation von Gl. (13.13) mit k^2 und Einführung von $\Gamma = H - C$ ergibt jetzt

$$\tilde{\Gamma} = \frac{\rho \cdot \tilde{C}^2}{k - \rho \tilde{C}}. \quad (13.16)$$

Die verschiedenen Abschlußrelationen kann man ebenfalls durch $c(r) = C(r)/r$, was man auch als Funktional $c[\gamma]$ von $\gamma(r) = \Gamma(r)/r$ auffassen kann, und durch die Mayer-Funktion f (vgl. den vorigen Abschnitt) gemäß

$$\begin{aligned} \text{HNC: } C(r) &= r \cdot c(r) = r \cdot (f(r) + 1) \cdot \exp(\Gamma(r)/r) - \Gamma(r) - r, \\ \text{PY: } C(r) &= (f(r) + 1) \cdot (r + \Gamma(r)) - \Gamma(r) - r = f(r) \cdot (r + \Gamma(r)), \\ \text{LM: } C(r) &= r \cdot (f(r) + 1) \cdot \exp(\Gamma(r)/r + E_{LM}(r)) - \Gamma(r) - r, \\ \text{MS: } C(r) &= r \cdot (f(r) + 1) \cdot \exp(\sqrt{1 + 2\Gamma(r)/r} - 1) - \Gamma(r) - r. \end{aligned} \quad (13.17)$$

ausdrücken. Hier ist $E_{LM}(r)$ die Brückenfunktion von Labík und Malijevský [235].

Im Falle von klassischen Einkomponentenplasmen, die im vorigen Abschnitt eingeführt wurden, muß man etwas anders vorgehen. Wegen der langreichweitigen Potentialanteile muß man Gl. (13.16) abändern. Unter Verwendung der Vorgehensweise von Ng [260] ergibt sich

$$\tilde{\Gamma}(k) = \frac{k \left(\tilde{C}^{(s)}(k) - k\tilde{u}^{(1)}(k) \right)}{k - \rho \left(\tilde{C}^{(s)}(k) - k\tilde{u}^{(1)}(k) \right)} - \tilde{C}^{(s)}(k). \quad (13.18)$$

Hier ist $\tilde{u}^{(1)}$ die Fourier-Transformierte des langreichweitigen Anteils $u^{(1)}$ des Paarpotentials. Außerdem ist $\tilde{C}^{(s)}(k)$ die Fourier-Transformierte des kurzreichweitigen Anteils der direkten Korrelationsfunktion, multipliziert mit k . Die explizite Beziehung von $C^{(s)}$ zu Γ hängt vom verwendeten Abschluß ab. Wir verwenden im folgenden den HNC-Abschluß ohne irgendeine Brückenfunktion, der hinreichend gute Ergebnisse für den interessierenden Bereich von Plasmaparametern Γ_p liefert [260]. Dann ist $C^{(s)}(r)$ durch

$$\text{HNC: } C^{(s)}(r) = r \exp \left(-\beta u^{(s)}(r) + \Gamma(r)/r \right) - \Gamma(r) - r \quad (13.19)$$

gegeben, wobei $u^{(s)}$ der kurzreichweitige Anteil des OCP-Paarpotentials aus dem vorigen Abschnitt ist. In diesem Fall ist Γ durch $\Gamma = H - C^{(s)}$ gegeben. Dies impliziert $g(r) = (\Gamma(r) + C^{(s)}(r))/r + 1$ für die Paarverteilungsfunktion.

Gleichung (13.16) definiert in Verbindung mit einer gewählten Abschlußrelation aus Gl. (13.17) eine Integralgleichung. Ebenso verhält es sich mit den Gleichungen (13.18)

und (13.19). Die Lösung jeder solchen Integralgleichung kann man als Fixpunktproblem für die unbekannte Funktion Γ auffassen.

Diese Integralgleichung löst man auf einem Gitter von M äquidistanten Punkten und setzt $\tilde{F}_\alpha = \tilde{F}(\alpha \cdot \Delta k)$, $F_\alpha = F(\alpha \cdot \Delta r)$ und $\Delta r \cdot \Delta k = \pi/M$. Gleichung (13.15) für die Fourier-Sinus-Transformation und ihre Umkehrung wird zu [66]

$$\tilde{F}_\alpha = 4\pi\Delta r \cdot \sum_{\beta=1}^{M-1} F_\beta \cdot \sin(\alpha\beta\frac{\pi}{M}), \quad F_\alpha = \frac{\Delta k}{2\pi^2} \cdot \sum_{\beta=1}^{M-1} \tilde{F}_\beta \cdot \sin(\alpha\beta\frac{\pi}{M}). \quad (13.20)$$

Demnach kann man den folgenden Algorithmus verwenden: Wähle ein $\Gamma^{(0)}$ (beispielsweise $\Gamma^{(0)} = 0$) für eine Menge von äquidistanten r und bestimme in Verbindung mit dem Abschluß die Größe $C^{(0)}$. Dies kann man mittels Gl. (13.20) transformieren, in Gl. (13.16) oder (13.18) einsetzen und so $\tilde{\Gamma}^{(1)}$ bestimmen, woraus man $\Gamma^{(1)}$ durch inverse Transformation bestimmt. Dieses $\Gamma^{(1)}$ wird jetzt als neue Eingabe für die Iteration verwendet. Diese Schleife wird solange durchlaufen, bis für gegebene Konvergenzschranke $\eta > 0$ die in folgender Gleichung definierte Größe $\zeta > 0$ die Schranke unterschreitet:

$$\zeta^2 = \sum_{i=1}^M (\Gamma_i^{(j)} - \Gamma_i^{(j-1)})^2 < \eta^2 \quad (13.21)$$

Die zeitaufwendigen Schritte sind die Transformationen von C und $\tilde{\Gamma}$. Deshalb möchte man die Zahl der benötigten Iterationen reduzieren. Man braucht üblicherweise 200 bis 100 Iterationen, um $\zeta < 10^{-10}$ zu erzielen.

Die Ornstein-Zernike-Gleichung mit entsprechendem Abschluß auf einem Gitter kann man als Fixpunktgleichung

$$\vec{\Gamma} = \Psi(\vec{\Gamma}) \quad (13.22)$$

für den Vektor $\vec{\Gamma} = (\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_M)$ interpretieren. Direkte Iteration entspricht dann genau der Gleichung

$$\vec{\Gamma}^{(j+1)} = \Psi(\vec{\Gamma}^{(j)}) \quad (13.23)$$

mit einem geeigneten Startvektor.

Unser Ziel ist daher, für die Vektorfolge $\vec{\Gamma}^{(j)} = (\Gamma_1^{(j)}, \Gamma_2^{(j)}, \dots, \Gamma_M^{(j)})$ der Komponenten der diskretisierten Funktion Γ auf dem Gitter eines aus früheren Kapiteln bekannten Vektorextrapolationsverfahren zu benutzen.

13.3 Numerische Resultate

Verschiedene Beispiele wurden untersucht, wie unten diskutiert. Es wurden ein Programm *directit* für direkte Iterationen ohne Vektorextrapolation und ein Programm *m2vj* benutzt, das ein Cycling-Verfahren der Form (7.42) für die Iterationsfunktion Ψ der direkten Iteration mit einer u -Variante der in Gl. (8.33) definierten Vektor- \mathcal{J} -Transformation mit

Tabelle 13.1: **Harte Kugeln**

Durchmesser: $\sigma = 1$, Teilchenzahldichte: $\rho^* = \rho/\sigma^{-3}$. Startvektor: $\Gamma^{(0)} = 0$, Gesamtzahl der Iterationen: N , Zahl der Gitterpunkte: M , Schranke: $\eta = 1 \cdot 10^{-10}$ (vgl. Gl. (13.21)), Abweichung: δ (vgl. Gl. (13.25)), Zykluslänge: m , Offset: n_{offset} , Plattform: Sun.

Programm	m	n_{offset}	δ	N
PY [†] -Näherung, $\rho^* = 0.7$ ($\Delta r = 0.01\sigma$, $M = 512$)				
<i>directit</i>	–	–	–	592
<i>m2vj</i>	8	14	Keine K bis 900 Iterationen	
<i>m2vj</i>	9	14	$7.092 \cdot 10^{-10}$	295
<i>m2vj</i>	9	15	$4.955 \cdot 10^{-10}$	306
<i>m2vj</i>	10	14	$4.935 \cdot 10^{-9}$	400
<i>m2vj</i>	10	15	$8.240 \cdot 10^{-10}$	346
PY [†] -Näherung, $\rho^* = 0.4$ ($\Delta r = 0.01\sigma$, $M = 512$)				
<i>directit</i>	–	–	–	124
<i>m2vj</i>	7	10	$4.904 \cdot 10^{-10}$	51
<i>m2vj</i>	8	5	$5.640 \cdot 10^{-11}$	41
<i>m2vj</i>	8	10	$4.681 \cdot 10^{-10}$	47
PY [†] -Näherung, $\rho^* = 0.7$ ($\Delta r = 0.04\sigma$, $M = 128$)				
<i>directit</i>	–	–	–	488
<i>m2vj</i>	8	10	$2.318 \cdot 10^{-9}$	209
HNC [†] -Näherung, $\rho^* = 0.7$ ($\Delta r = 0.01\sigma$, $M = 512$)				
<i>directit</i>	–	–	–	384
<i>m2vj</i>	9	14	$3.080 \cdot 10^{-9}$	455
<i>m2vj</i>	10	13	$2.716 \cdot 10^{-9}$	179
<i>m2vj</i>	10	14	$2.963 \cdot 10^{-9}$	257
<i>m2vj</i>	11	13	$3.022 \cdot 10^{-9}$	182

[†] Die Abkürzungen für die Abschlüsse sind auf Seite 285 erklärt. Siehe auch Gl. (13.17).

$r_n^{(k)} = 1/(n+1)$ implementierte. Verwendet wurden m -Zyklen der Form (7.41) mit der Transformation

$$T(\vec{u}_0, \vec{u}_1, \dots, \vec{u}_m) = {}_V \vec{J}_0^{(m)}(\{\vec{u}_n\}, \{(n+1)\Delta\vec{u}_{n-1}\}, \{(n+1)^{-1}\mathbf{1}\}). \quad (13.24)$$

und n_{offset} Voriterationen ohne Extrapolation.

Die Länge m der Zyklen wurde variiert. Man beachte, daß die Verwendung des Programmes *m2vj* mit $m = 0$, also ohne Cycling ebenfalls auf direkte Iterationen ohne Extrapolation hinausläuft.

Tabelle 13.2: **Lennard-Jones-Potential**

LJ[†]-Parameter: $\sigma = 1$, $\beta\varepsilon = 0.5$, Teilchenzahldichte: $\rho^* = \rho/\sigma^{-3}$. Gitter: $M = 512$, $\Delta r = 0.01\sigma$, Schranke: $\eta = 1 \cdot 10^{-10}$, Startvektor: $\Gamma^{(0)} = 0$, Plattform: Sun. Weitere Symbole siehe Tabelle 13.1.

Programm	m	n_{offset}	δ	N
PY [†] -Näherung, $\rho^* = 0.5$				
<i>directit</i>	–	–	–	137
<i>m2vj</i>	7	10	$6.532 \cdot 10^{-10}$	51
<i>m2vj</i>	8	10	$4.950 \cdot 10^{-10}$	56
PY [†] -Näherung, $\rho^* = 0.9$				
<i>directit</i>	–	–	–	958
<i>m2vj</i>	7	20	$8.174 \cdot 10^{-9}$	349
<i>m2vj</i>	7	30	$4.296 \cdot 10^{-9}$	383
<i>m2vj</i>	8	20	$4.705 \cdot 10^{-9}$	372
<i>m2vj</i>	10	50	$7.854 \cdot 10^{-9}$	480
HNC [†] -Näherung, $\rho^* = 0.9$				
<i>directit</i>	–	–	–	615
<i>m2vj</i>	8	30	$1.234 \cdot 10^{-10}$	517

[†] Die Abkürzungen für die Abschlüsse sind auf Seite 285 erklärt. Siehe auch Gl. (13.17).

[‡] Das Lennard-Jones-Potential ist in Gl. (13.5) definiert.

Um festzustellen, ob man zum richtigen Fixpunkt iteriert, wurde die Differenz der konvergierten Vektoren $\vec{\Gamma} = (\Gamma_\alpha)$ mit und ohne Extrapolation bzw. die Größe

$$\delta = \sqrt{\sum_{\alpha=1}^M (\Gamma_\alpha^{directit} - \Gamma_\alpha^{m2vj})^2} \quad (13.25)$$

berechnet, wobei M die Vektorlänge bzw. Zahl der Gitterpunkte bedeutet.

Als erstes Beispiel betrachten wir ein System harter Kugeln bei verschiedenen Dichten und den PY- und HNC-Näherungen. Die Rechnungen wurden auf eine Sun Sparc Workstation durchgeführt. Gewählt wurden 512 oder 128 Gitterpunkte für die Funktion Γ mit $\Delta r = 0.01\sigma$, wobei σ der Kugeldurchmesser ist. Die Zahl der Iterationen, die man zum Erreichen der Konvergenzschranke η gemäß Gl. (13.21) mit $\Gamma^{(0)} = 0$ benötigt, wird mit N bezeichnet. Die Resultate in Tabelle 13.1 zeigen, daß es möglich ist, die Gesamtzahl der Iterationen N etwa um den Faktor 2 zu reduzieren. Der Beschleunigungseffekt hängt nicht wesentlich von der Wahl der Brückenfunktion E ab. Es gab auch eine ganze Bandbreite von Werten für m und n_{offset} , für die man relativ gute Ergebnisse erzielen konnte. Wie in Tabelle 13.1 gezeigt, gab es keinen signifikanten Unterschied zwischen den resultierenden Vektoren $\vec{\Gamma}$ mit und ohne Extrapolation, da $\delta \approx 10^{-10}$ gilt.

Tabelle 13.3: **Harte Kugeln und Lennard-Jones-Potential**

Kugeldurchmesser/LJ[‡]-Parameter: $\sigma = 1$. Startvektor: $\Gamma^{(0)} = 0$, Schranke: $\eta = 1 \cdot 10^{-10}$ (vgl. Gl. (13.21)), Gittergröße: $M = 1024$. Programm: *m2vj*, Plattform: Iris Indigo. Weitere Symbole siehe Tabelle 13.1.

m	n_{offset}	N
LM [†] Brückenfunktion, harte Kugeln, $\rho^* = 0.75$ ($\Delta r = 0.005\sigma$)		
0	–	576
14	150	361
15	100	309
16	120	308
16	150	389
MS [†] -Näherung, harte Kugeln, $\rho^* = 0.80$ ($\Delta r = 0.005\sigma$)		
0	–	913
9	0	611
9	1	572
15	100	581
15	200	537
MS [†] -Näherung, Lennard-Jones [‡] , $\beta\varepsilon = 0.5$, $\rho^* = 0.90$ ($\Delta r = 0.005\sigma$)		
0	–	840
15	20	661
15	100	469
15	120	681
MS [†] -Näherung, Lennard-Jones [‡] , $\beta\varepsilon = 0.1$, $\rho^* = 1.20$ ($\Delta r = 0.01\sigma$)		
0	–	956
7	0	241
7	1	378

[†] Die Abkürzungen für die Abschlüsse sind auf Seite 285 erklärt. Siehe auch Gl. (13.17).

[‡] Das Lennard-Jones-Potential ist definiert in Gl. (13.5).

Die gleichen Abschlußrelationen wurden auch für Lennard-Jones-Systeme angewendet. Die Resultate findet man in Tabelle 13.2. Wiederum sind deutliche Reduktionen der Gesamtzahl der Iterationen möglich.

Untersucht wurde auch die Näherungen von Labík und Malijeuský (LM) sowie von Martynov und Sarkisov (MS) für harte Kugeln und für Lennard-Jones-Systeme. Die Resultate findet man in Tabelle 13.3. In diesem Fall wurden die Rechnungen auf eine Iris Indigo von Silicon Graphics durchgeführt, mit 1024 Gitterpunkten und $\Delta r = 0.005\sigma$. Der Startvektor war $\Gamma^{(0)} = 0$. Wie oben bemerkt, entspricht der Fall $m = 0$ der alleinigen

Tabelle 13.4: **Einkomponentenplasmen**

Plasmaparameter: Γ_p , $a = 1$ (vgl. Gl. (13.7)). HNC[†]-Näherung. Ng-Renormierung, α (Parameter in der Fehlerfunktion): $1.08/a$ (vgl. Gl. (13.8) und [260]). Teilchenzahldichte: $\rho = 3/(4\pi a^3)$. Gitter: $M = 1024$, $\Delta r = 0.01 a$. Startvektor: $\Gamma^{(0)} = 0$. Programm: *m2vj*, Plattform: Iris Indigo. Weitere Symbole siehe Tabelle 13.1.

Γ_p	m	n_{offset}	N
10	0	–	70
10	5	0	55
10	7	5	30
10	8	5	33
10	10	0	23
50	0	–	252
50	7	10	75
50	10	0	78
50	10	10	77
100	0	–	458
100	8	40	275
100	8	60	412
100	10	10	275
100	10	50	161
100	14	40	341
120	0	–	537
120	8	100	614
120	10	50	414
120	10	100	189
120	12	100	361

[†] Die Abkürzungen für die Abschlüsse sind auf Seite 285 erklärt. Siehe auch Gl. (13.17).

Verwendung der direkten Iteration.

Als weiteres Beispiel zeigen wir in Tabelle 13.4 Resultate von Rechnungen an klassischen Einkomponentenplasmen mit Ng-Renormierung [260] in HNC-Näherung. Es wurden wieder $M = 1024$ Punkte im Gitter und ein Startvektor $\Gamma^{(0)} = 0$ verwendet. Man beachte, daß es für größere Plasmaparameter Γ_p vorteilhaft ist, eine größere Zahl n_{offset} von Voreriterationen ohne Beschleunigung als für kleinere Γ_p , die Länge m der Zyklen aber nicht wesentlich verändert zu werden brauchte. Die besten Resultate ergaben sich für fast alle Γ_p mit $m = 10$.

Den Tabellen kann man entnehmen, daß die Extrapolation erfolgreich verläuft, wenn

Tabelle 13.5: CPU-Zeiten Plasmaparameter (vgl. Gl. (13.7)): Γ_p . Plattform: Sun

Γ_p	Direkte Iterationen allein	Direkte Iterationen + Extrapolation	Ersparnis
100	37.7 s	28.0 s	25.7 %
120	44.1 s	22.0 s	50.1 %

man eine genügende Zahl von Voriterationen ausführt, wobei oft größenordnungsmäßig $n_{offset}=10$ ausreicht. Bei größeren Teilchenzahldichten wie in Tabelle 13.3 kann es nötig sein, mehr Voriterationen auszuführen. In dem angeführten Fall erhielt man meist die besten Resultate mit 100 oder mehr Voriterationen. Allerdings kann man manchmal auch ganz auf Voriterationen verzichten, selbst bei hohen Dichten, wie im letzten Beispiel in Tabelle 13.3. Die Länge m der Zyklen braucht nicht besonders hoch zu sein, häufig erzielt man gute Resultate mit Werten zwischen 8 und 20. Dies ist vorteilhaft, weil der Zusatzaufwand aufgrund der Extrapolation um so geringer ist, je kürzere Zyklen man verwenden kann. Zu lange Zyklen können auch die Qualität der Resultate beeinträchtigen, wie man in den Tabellen 13.2 und 13.3 sieht. Für Lennard-Jones-Systeme erhält man Resultate ähnlicher Qualität wie im Falle harter Kugeln, wie die Tabellen 13.2 und 13.3 belegen. Vor allem beachte man die relativ hohen Dichten bis $\rho^* = 1.2$ in Tabelle 13.3, für man bisher keine Konvergenz unter Verwendung direkter Iteration mit Startvektor $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$ für möglich hielt [216].

Um die Zusatzkosten für die Extrapolationsschritte im Cycling-Verfahren zu bestimmen, wurde die gesamte CPU-Zeit (*Central Processing Unit*) für die Ausführung der Programme für verschiedene Beispiele bestimmt. Man beachte allerdings, daß derartige Angaben vorsichtig interpretiert werden müssen, da die Resultate nicht nur von den zugrundeliegenden Algorithmen, sondern auch von den Fähigkeiten der Programmierer (auch der Compiler) sowie von der Architektur und der zur Laufzeit vorliegenden Auslastung der verwendeten Rechner abhängen.

Als wesentliches Ergebnis erhält man die Aussage, daß für typische Zykluslängen und Gittergrößen die Kosten pro Iteration für den Extrapolationsanteil etwa gleich den Kosten für die direkte Iteration allein sind. Das heißt übrigens, daß die Kosten für die direkte Iteration ziemlich gering sind, was durch die Verwendung des FFT-Verfahrens bedingt ist. Für kompliziertere Iterationsfunktionen Ψ erwartet man, daß die relativen Kosten für die Extrapolation sinken, so daß sich die Nützlichkeit der Extrapolationsverfahren wesentlich deutlicher bemerkbar machen würde. Aber selbst für solch schnelle direkten Iterationen wie in der vorliegenden Anwendung auf die OZ-Gleichung kann man die Gesamtausführungszeit reduzieren, in einigen Fällen sogar auf die Hälfte, wenn man Vektorextrapolation verwendet. Dies wird in den folgenden Beispielen belegt. Wir bemerken noch, daß sich in diesem Fall auszahlt, daß man nicht wie im Falle des Newton-Raphson-Verfahrens Ableitungen zur Berechnung einer abgeänderten Iterationsfunktion heranziehen muß, was die Kosten pro Iteration deutlich erhöhen würde.

Der Fall klassischer Einkomponentenplasmen ist in Tabelle 13.5 dargestellt. Für gegebenen Plasmaparameter Γ_p wird die gesamte Zeit für die direkte Iteration allein, also mit

Tabelle 13.6: **Harte Kugeln für hohe Dichten**

Dichte $\rho^* = 0.85$. LM[†]-Näherung. Programm: *m2vj*, Plattform: Iris Indigo. Gitter: $M = 512$, $\Delta r = 0.01\sigma$. Schranke: $\eta = 10^{-10}$. Weitere Symbole siehe Tabelle 13.1.

Beispiel	m	n_{offset}	N
1	9	40	991
2	9	100	891
3	9	150	881
4	9	200	981

[†] Die Abkürzungen für die Abschlüsse sind auf Seite 285 erklärt. Siehe auch Gl. (13.17).

$m = 0$, verglichen mit der gesamten Ausführungszeit für das Cycling-Verfahren mit der laut Tabelle 13.4 hinsichtlich der Iterationszahl optimalen Zahl der Voriterationen und Zyklenlänge $m \neq 0$. Für $\Gamma_p = 120$ wird beispielsweise die CPU-Zeit für $m = 0$ mit der für $m = 10$ und $n_{offset} = 100$ verglichen.

Ein ähnliches Resultat ergab sich für das letzte Beispiel aus Tabelle 13.3: 88.5 Sekunden brauchte die direkte Iteration, dagegen 44.6 Sekunden das Cycling-Verfahren, was einer Ersparnis von 49.6 % der CPU-Zeit entspricht.

Es sei betont, daß für die vorgeschlagene Methode auf der Grundlage der OZ-Gleichung die Rechenzeiten sehr gering sind. Auf heutigen Workstations erfordert jeder Lauf Zeiten in der Ordnung von Minuten. Dies sollte man mit Laufzeiten von Computersimulationen vergleichen, die Stunden oder gar Tage betragen.

Aufgrund der geringen Laufzeiten ist die Lösung der OZ-Gleichung als nichtriviales Beispiel auch gut für Untersuchungen von Vektorextrapolationsverfahren geeignet.

Schließlich soll noch ein Beispiel angegeben werden, daß man mit Vektorextrapolationsverfahren erfolgreich Fixpunkte bestimmen kann, für die die direkte Iteration divergiert. Der Startvektor ist dabei $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$. Bemerkenswerterweise divergiert für diesen Startvektor sogar der Newton-Raphson-Algorithmus von Labík, Malíjevský, und Voňka [216].

Das Beispiel ist ein System harter Kugeln der Dichte $\rho^* = 0.85$ in der LM-Näherung. Mit $M = 512$ Gitterpunkten mit Abständen $\Delta r = 0.01\sigma$ erhält man die folgenden Resultate:

- Der Newton-Raphson-Algorithmus [216] konvergiert nicht für $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$ als Startvektor. Es konvergiert für einen besseren Startvektor (beispielsweise aus einem Lauf mit geringerer Dichte)
- Die direkte Iteration konvergiert nicht für einen Startvektor $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$. Sie konvergiert auch nicht, wenn man das konvergierte Resultat des Newton-Raphson-Algorithmus als Startvektor verwendet. Das zeigt, daß es sich um einen instabilen Fixpunkt handelt. Siehe auch die Abbildungen 13.1 und 13.2.
- Direkte Iteration in Verbindung mit der Vektorextrapolation konvergiert für einen Startvektor $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$ zur gleichen Lösung wie der Newton-Raphson-Algorithmus.

Einige Beispiele sind in Tabelle 13.6 dargestellt.

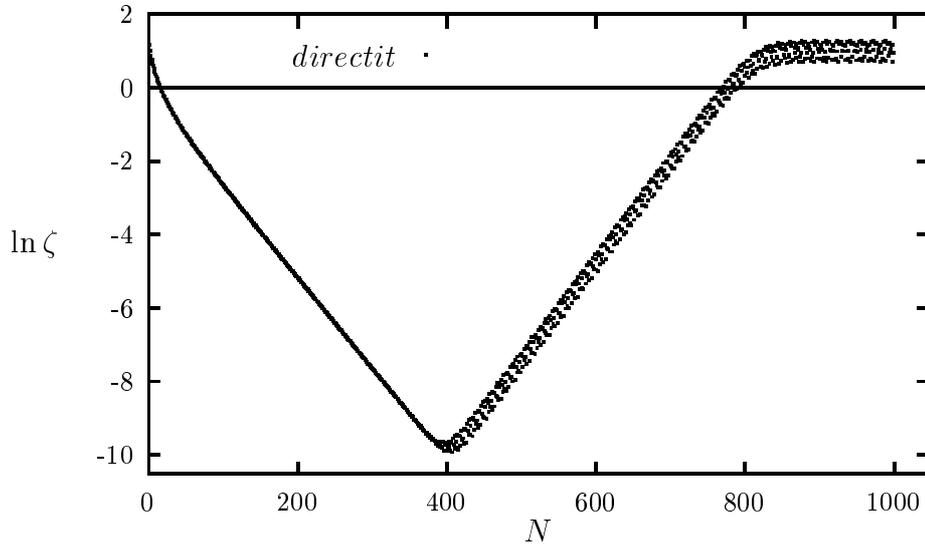


Abbildung 13.1: Instabiler Fixpunkt der Direkten Iteration

In Abbildung 13.1, sind die Werte von ζ aus Gl. (13.21) für dieses Beispiel für den Fall der direkten Iteration halblogarithmisch aufgetragen. ζ ist also ein Maß für die Differenz aufeinanderfolgender Iterationsvektoren.

Man sieht deutlich, daß die direkte Iteration zunächst zu konvergieren scheint, dann aber beginnen rasche Änderungen, bis ein quasiperiodisches Verhalten erreicht wird. Letzteres ist in expandierter Darstellung in Abbildung 13.2 zu sehen.

In Abbildung 13.3 sind analog die Werte von ζ aus Gl. (13.21) für das dritte Beispiel aus Tabelle 13.6 gezeigt, wobei jetzt auch Vektorextrapolation verwendet wird. Die Konvergenz ist ziemlich glatt abgesehen von einigen Stufen.

Interessanterweise konvergiert für das gleiche System bei der geringfügig kleineren Dichte $\rho^* = 0.8$ und gleichem Gitter die direkte Iteration ausgehend vom Startvektor $\vec{\Gamma}^{(0)} = 0$, während der Newton-Raphson-Algorithmus von Labík, Malijevský und Voňka [216] ausgehend vom gleichen Startvektor auch in diesem Fall *nicht* konvergiert.

Ein wichtiger Vorteil der beschriebenen Vorgehensweise ist die einfache Form der direkten Iteration. Dies erleichtert die Behandlung komplizierterer Systeme wie Teilchen mit Dipolen oder realistischeren Paarpotentialen auf einem Gitter. Im wesentlichen muß man nur ein Unterprogramm zur Berechnung der Mayer-Funktion ändern. Auch vom Falle von renormierten OZ-Verfahren wie im OCP-Falle sind die nötigen Änderungen an den Programmen relativ gering. Das ist natürlich für andere Algorithmen, die Ableitungen benötigen, deutlich komplizierter.

Die Anwendung weiterer Vektorextrapolationsverfahren könnte zu ähnlich guten Ergebnissen führen. Dies ist ein aussichtsreicher Punkt für weitere Untersuchungen, wie auch

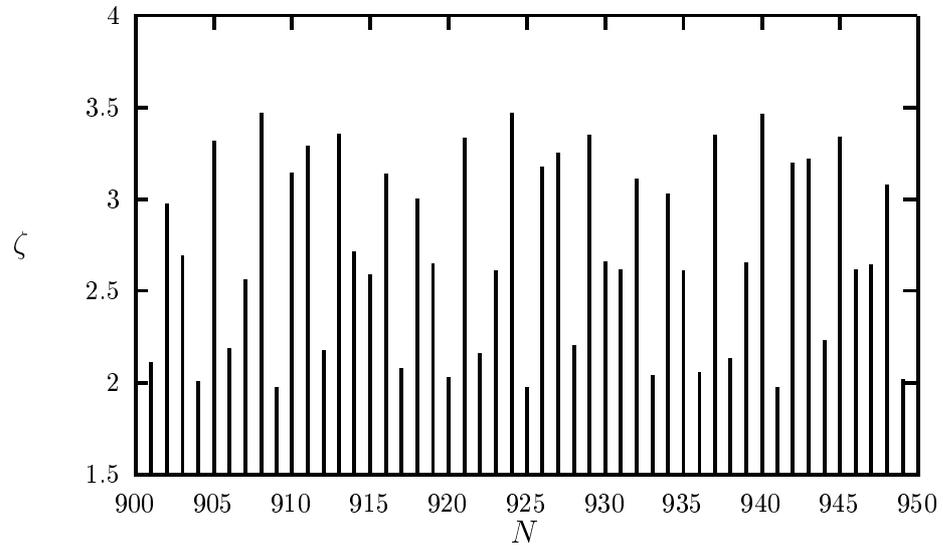


Abbildung 13.2: Quasiperiodisches Verhalten der Direkten Iteration

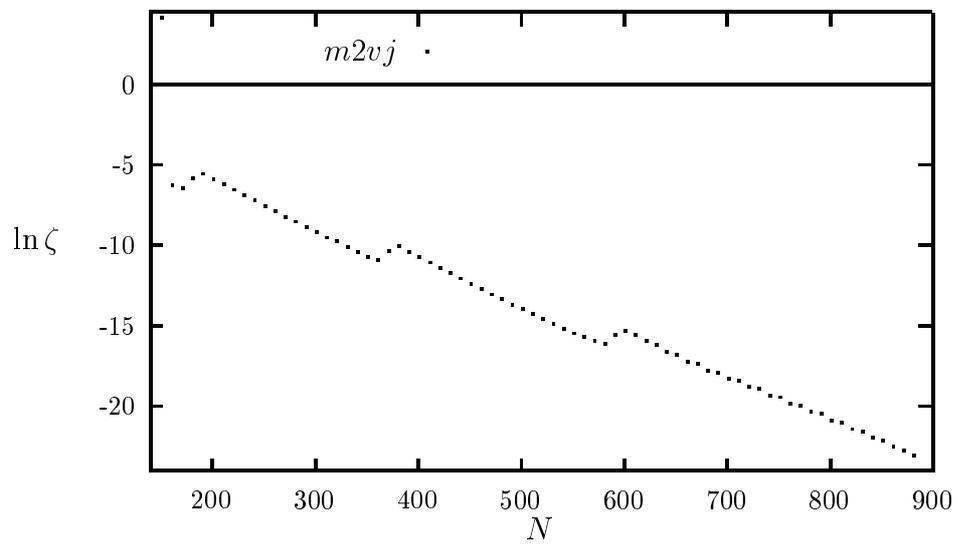


Abbildung 13.3: Konvergenz des Cycling-Verfahrens

die Ausdehnung der Extrapolationsmethodik auf kompliziertere Modellpotentiale und Systeme mit mehreren Komponenten.

Zusammenfassend hat sich die Kombination von direkter Iteration und der Vektor- \mathcal{J} -Transformation als fruchtbare Alternative zu anderen Verfahren zur Lösung der OZ-Gleichung erwiesen.

Kapitel 14

Zusammenfassung

In dieser Arbeit werden Extrapolationsverfahren für Zahlen-, Vektor- und Matrizenfolgen und ihre Anwendung in der Theoretischen und Physikalischen Chemie behandelt.

Die Arbeit gliedert sich in drei Teile. In Teil I werden Methoden für die Extrapolation vorgestellt und in ihren Eigenschaften charakterisiert, in Teil II werden Anwendungen dieser Methoden auf eine ganze Reihe verschiedener Probleme aus dem Bereich der Theoretischen und Physikalischen Chemie besprochen und in Teil III wird ergänzendes Material in Anhängen bereitgestellt.

Nach einer Einleitung in Kapitel 1 beginnt Teil I. In Kapitel 2 werden bekannte Verfahren für die Extrapolation von Zahlenfolgen besprochen. Dabei werden zunächst als Grundlagen eine Klassifikation von Zahlenfolgen, die für die richtige Wahl der Extrapolationsverfahren hilfreich ist, einige allgemeine Kriterien für die Konstruktion von Extrapolationsverfahren sowie die Rolle von Rekursionsschemata bei der Darstellung und Implementierung dieser Verfahren besprochen. Im Anschluß werden dann wichtige bekannte Verfahren vorgestellt, soweit sie für diese Arbeit von Bedeutung sind.

In Kapitel 3 werden iterative Folgentransformationen behandelt. Hier werden zunächst Grundprinzipien zu und Probleme bei ihrer Konstruktion, dann im Detail das Konzept der hierarchischen Konsistenz dargestellt, das diese Probleme lösen hilft und eine neue methodische Basis für die Konstruktion iterativer Verfahren an die Hand gibt. Dabei werden Hierarchien von Modellfolgen eingeführt und die Iteration als Abbildung zwischen den verschiedenen Ebenen der Hierarchie beschrieben. Dann wird die \mathcal{J} -Transformation zum Thema, bei deren Herleitung und theoretischen Behandlung das Konzept der hierarchischen Konsistenz in voller Breite seine Nützlichkeit erweist. Da die \mathcal{J} -Transformation eine sehr allgemeine Extrapolationsmethode darstellt, wird sie gründlich untersucht. Verschiedene effiziente Algorithmen zu ihrer Berechnung werden eingeführt. Es werden grundlegende mathematische Eigenschaften dieser Transformation bewiesen. Der explizite Kern der Transformation wird abgeleitet, was insofern beachtenswert ist, als dies für die meisten anderen iterativen Transformation bisher nicht oder nur unvollständig gelungen ist. Für die theoretische Charakterisierung der Transformation werden Determinantendarstellungen angegeben und eine Reihe von Sätzen bewiesen, in denen die Konvergenzeigenschaften behandelt werden. Ausführlich wird auf die Relation zu anderen Folgentransfor-

mationen eingegangen. Dabei zeigt sich, daß viele bekannte Verfahren Spezialfälle der \mathcal{J} -Transformation sind. Durch die Vielzahl von Varianten aufgrund von verschiedener Wahl von Hierarchie sowie der Restabschätzungen erweist sich die \mathcal{J} -Transformation als sehr flexibel. Sie kann aufgrund einfacher heuristischer Prinzipien an eine Vielzahl von Problemen angepaßt werden. Daher verwundert es nicht, daß die am Ende von Kapitel 3 dargestellten numerischen Tests erweisen, daß geeignete Varianten der \mathcal{J} -Transformation zu den besten bekannten Transformationen bei gut untersuchten Modellproblemen gehören.

In Kapitel 4 werden die im Zusammenhang von Levin-artigen Transformationen bedeutsamen Restabschätzungen genauer untersucht. Es wird im besonderen auf die Möglichkeiten eingegangen, die sich bieten, falls eine Kummer-Transformation für die Partialsummen unendlicher Reihen möglich ist, wenn also das asymptotische Verhalten der Terme bekannt ist und eine asymptotisch verwandte Reihe geschlossen aufsummiert werden kann. Es wird eine neue Form der Restabschätzung vorgeschlagen, die auf dieser verwandten Reihe basiert. In numerischen Beispielen wird demonstriert, daß dieses neue Verfahren bekannten durchaus überlegen sein kann.

In Kapitel 5 wird auf Verfahren für die Extrapolation von Orthogonalentwicklungen eingegangen. Es werden am Anfang Methoden für Fourier-Reihen behandelt. Zunächst wird die \mathcal{H} -Transformation auf der Grundlage einer Modellfolge eingeführt, die die von Levin verallgemeinert. Rekursive Algorithmen zur effizienten Berechnung und grundlegende mathematische Eigenschaften dieser Transformation werden abgeleitet. Im Anschluß werden Sätze bewiesen, die Aussagen über die Konvergenzbeschleunigung mittels der \mathcal{H} -Transformation beinhalten. Es wird auf die Implementierung der Transformation eingegangen, was zu einem sehr einfachen Programm mit geringen Speicherplatzanforderungen führt. Dies ist als Beispiel für die ähnlich knappen und effizienten Programme der anderen neu eingeführten Transformationen in Anhang D angegeben. Numerische Beispiele belegen, daß diese Transformation sehr erfolgreich zur Konvergenzbeschleunigung von Fourier-Reihen eingesetzt werden kann. Eine Verallgemeinerung der \mathcal{H} -Transformation auf Fourier-Reihen mit mehrere Grundfrequenzen wird hergeleitet. Im Anschluß wird als eine iterative Methode für die Extrapolation von Fourier-Reihen die \mathcal{I} -Transformation eingeführt, wobei das Konzept der hierarchischen Konsistenz zur Herleitung und Charakterisierung eingesetzt wird. Verschiedene Algorithmen zur effizienten Berechnung dieser Transformation werden diskutiert. Mit numerischen Test wird belegt, daß diese Transformation ebenfalls in der Lage ist, Fourier-Reihen zu beschleunigen, wobei geeignete Varianten ähnlich effizient wie die \mathcal{H} -Transformation sein können. Es wird auf die besonderen Schwierigkeiten eingegangen, die sich in der Nähe von Sprungstellen und Singularitäten ergeben, und als Ausweg die Verwendung der Methode der Frequenzvervielfachung eingeführt. Als Alternative zur Verwendung spezieller Algorithmen für Fourier-Reihen wird vorgeschlagen, die Fourier-Reihen auf andere Reihentypen zurückzuführen, für die dann die aus Kapitel 2 und 3 bekannten Verfahren anwendbar werden. Hier spielt einerseits die Rückführung auf alternierende Reihen eine Rolle, die sich als recht erfolgreich in der Nähe von Singularitäten erweist, andererseits die Rückführung auf komplexe Potenzreihen. Diese ist in einfacher Form schon lange bekannt (Methode der assoziierten Reihen für reelle Reihen, deren Koeffizienten nicht oszillieren), konnte aber in der Methode der zugeordneten

Reihen und vor allem in der neu eingeführten verallgemeinerten Methode der zugeordneten Reihen zu einer effizienten Verfahrensweise für kompliziertere Fälle ausgebaut werden. Im Anschluß wird gezeigt, wie man diese Methoden auf Entwicklungen nach Orthogonalpolynomen verallgemeinern kann. Als iteratives Verfahren wird die \mathcal{K} -Transformation auf der Grundlage des Konzepts von der hierarchischen Konsistenz eingeführt, für die einfache Algorithmen vorliegen. Alternativ kann man auch hier die verallgemeinerte Methode der zugeordneten Reihen verwenden. Beide Verfahren kann man in der Nähe von Singularitäten mit der Methode der Frequenzvervielfachung kombinieren. Die Effizienz beider Zugänge wird mittels numerischer Beispiele belegt.

In Kapitel 6 werden Extrapolationsverfahren vorgestellt, die auf störungstheoretische Probleme zugeschnitten sind. Ein Problem, das die Anwendung anderer Extrapolationsmethoden behindert, ist die oft nur kleine Zahl der berechenbaren Terme der Störungsentwicklung. Es werden Verfahren besprochen, die auf einer einfachen Renormierung der Störungsreihe beruhen, bei der der ungestörte Hamilton-Operator mit einem konstanten Faktor skaliert wird, der variativ bestimmt wird. Dies führt zu neuen Approximationen der Gesamtenergie über die Goldhammer-Feenberg- und die Feenberg-Reihe. Alternativ kann man das Verfahren der effektiven charakteristischen Polynome verwenden, in dem die Koeffizienten des Polynoms nicht im Sinne eines linearen Variationsverfahrens, sondern durch Anpassung an die Störungstheorie bestimmt werden.

In den Kapiteln 7 und 8 werden Extrapolationsverfahren für Vektor- und Matrixfolgen behandelt. In Kapitel 7 werden bekannte Verfahren besprochen, wobei zunächst als Grundlagen das Konzept der Pseudoinversen, die bei Vektoren echte Inverse ersetzen, ferner Besonderheiten bei Iterationsfolgen sowie Funktionen von Matrizen im allgemeinen behandelt werden. Im Anschluß werden dann einige bekannte Algorithmen für Vektor- und Matrixfolgen vorgestellt.

In Kapitel 8 werden Verallgemeinerungen der \mathcal{J} -Transformation auf Vektor- und Matrixfolgen eingeführt. Diese stützen sich auf die in Kapitel 7 eingeführten Pseudoinversen und stellen Transformationen mit großem Potential für die Anwendungen dar. Dies wird durch numerische Beispiele belegt, bei denen die Berechnung der Matrixexponentialfunktion behandelt wird.

Mit Kapitel 9 beginnt Teil 2. In Kapitel 9 wird besprochen, wie Extrapolationsverfahren auf die Berechnung der Linienform spektraler Löcher angewendet werden können. Dazu wird zunächst ein einfaches Modell umrissen, in dem bestimmte Faltungsintegrale auftauchen. Im Anschluß werden Darstellungen für diese Faltungsintegrale diskutiert, auf deren Grundlage dann die Integrale berechnet werden. Als Beispiel wird die Bestimmung von interessierenden Parametern durch den Fit experimenteller Daten unter Verwendung von auf den Extrapolationsverfahren beruhenden Programmen dargelegt.

In Kapitel 10 werden Anwendungen der in Kapitel 5 eingeführten Methoden für Orthogonalentwicklungen auf Multipolentwicklungen des elektrostatischen Potentials sowie dreizentrig Kernanziehungsintegrale mit exponentialartigen Basisfunktionen diskutiert. An einem einfachen Beispiel wird dann gezeigt, daß Extrapolationsverfahren — hier in Gestalt der \mathcal{K} -Transformation — zu deutlichen Konvergenzverbesserungen bei Multipolentwicklungen und Entwicklungen dreizentrig Kernanziehungsintegrale nach Kugelflächenfunk-

tionen führen können.

In Kapitel 11 wird die Berechnung von Quasiteilchenkorrekturen auf der Basis der inversen Dyson-Gleichung referiert. Diese ist von Interesse, um den Einfluß der Korrelation im Rahmen eines Einteilchenbildes zu beschreiben. Die inverse Dyson-Gleichung in diagonalen Näherung wird durch direkte Iteration gelöst. Es wird gezeigt, wie man diese Methode durch ein geeignetes Extrapolationsverfahren, das Overholt-Verfahren drastisch beschleunigen kann.

In Kapitel 12 werden die in Kapitel 6 beschriebenen Methoden auf die Møller-Plesset-Störungsreihe angewandt. Es wird gezeigt, daß diese kombinierten Methoden zu Näherungen führen, die *size-extensive* sind. Außerdem wird durch Betrachtung einer Vielzahl von Benchmarkrechnungen an kleineren Molekülen gezeigt, daß die Feenberg-, Goldhammer-Feenberg- und Padé-Extrapolationen sowie die Π_2 -Methode auf der Grundlage von effektiven charakteristischen Polynomen zu verlässlichen und genauen Schätzwerten für die Korrelationsenergie führen. Es wird vorgeschlagen, die Abweichung der verschiedenen Näherungen untereinander als Kriterium für die Anwendbarkeit der auf der Møller-Plesset-Störungsreihe basierenden Verfahren zu verwenden.

In Kapitel 13 wird die Lösung der Ornstein-Zernike-Gleichung mit verschiedenen Abschlußrelationen behandelt. Die Lösung dieser Gleichung liefert die Zweiteilchenverteilungsfunktion g der klassischen Vielteilchentheorie, aus der man die thermodynamischen Eigenschaften des jeweils betrachteten Systems berechnen kann. Die Ornstein-Zernike-Gleichung mit dem jeweiligen Abschluß ist eine nichtlineare Integralgleichung, die man durch direkte Iteration lösen kann. Es wird gezeigt, daß man durch die Verwendung einer Variante der Vektor- \mathcal{J} -Transformation den Rechenaufwand um bis zu 50 % verringern kann. Außerdem werden Beispiele vorgestellt, bei denen eine bei direkter Iteration divergente Iterationsfolge durch das Extrapolationsverfahren in eine konvergente Folge transformiert wird.

Die vorliegende Zusammenfassung beschließt Teil 2.

In Teil 3 findet man als ergänzendes Material einige Anhänge. In Anhang A werden grundlegende Notationen und Definitionen zusammengestellt. In Anhängen B und C werden einige mehr technische Lemmas bewiesen, die die Ausführungen in den Kapiteln 3 und 9 ergänzen. In Anhang D wird exemplarisch für verschiedene Extrapolationsverfahren ein Fortran-Programm für die Implementierung der \mathcal{H} -Transformation vorgestellt. In Anhang E schließlich wird gezeigt, wie man die Methode der effektiven charakteristischen Polynome aus Kapitel 6 auf den Fall mehrerer Störungsreihen erweitern kann.

Teil III
Anhänge

Anhang A

Zusammenstellung wichtiger Notationen und Definitionen

A.1 Definition von Mengensymbolen

Natürliche Zahlen:

$$\mathbb{N} = \{1, 2, 3, \dots\}, \quad \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\} \quad (\text{A.1})$$

Ganze Zahlen:

$$\mathbb{Z} = \mathbb{N} \cup \{0, -1, -2, -3, \dots\} \quad (\text{A.2})$$

Rationale Zahlen:

$$\mathbb{Q} = \{x : x \text{ rational}\} \quad (\text{A.3})$$

Reelle Zahlen und Vektoren:

$$\begin{aligned} \mathbb{R} &= \{x : x \text{ reell}\}, \\ \mathbb{R}_+ &= \{x \in \mathbb{R} : x > 0\}, \\ \mathbb{R}^3 &= \{\vec{r} = (x, y, z) : x, y, z \in \mathbb{R}\}, \\ \mathbb{R}^n &= \{(x_1, \dots, x_n) : x_j \in \mathbb{R}, j = 1, \dots, n\} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Komplexe Zahlen:

$$\mathbb{C} = \{x + iy : x \in \mathbb{R}, y \in \mathbb{R}, i^2 = -1\} \quad (\text{A.5})$$

Ist $z = x + iy$, so sind Real- und Imaginärteil über $x = \Re(z)$, $y = \Im(z)$ gegeben.

A.2 Definition spezieller Symbole und Funktionen

Gamma-Funktion [234, S. 1]:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} \exp(-t) dt \quad (\text{A.6})$$

Fakultät:

$$n! = \Gamma(n + 1) = \prod_{j=1}^n j \quad (\text{A.7})$$

Doppelfakultät:

$$(-1)!! = 1, 0!! = 1, (n + 1)!! = (n + 1) \cdot (n - 1)!! \quad (\text{A.8})$$

Pochhammer-Symbol [234, S. 2]:

$$(a)_n = \frac{\Gamma(a + n)}{\Gamma(a)} = \prod_{j=1}^n (a + j - 1) \quad (\text{A.9})$$

Binomialkoeffizient [2, S. 256, Gl. (6.1.21)]:

$$\binom{z}{w} = \frac{\Gamma(z + 1)}{\Gamma(w + 1)\Gamma(z - w + 1)} \quad (\text{A.10})$$

Beta-Funktion [234, S. 7]:

$$B(x, y) = \frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x + y)} = \int_0^1 t^{x-1}(1 - t)^{y-1} dt \quad (\text{A.11})$$

Differenzenoperator:

$$\Delta_k f(k) = f(k + 1) - f(k), \quad \Delta_k g_k = g_{k+1} - g_k. \quad (\text{A.12})$$

Standardmässig wird die Differenz bezüglich n genommen:

$$\Delta = \Delta_n. \quad (\text{A.13})$$

Entier-Funktion:

$$\llbracket x \rrbracket = \max\{j \in \mathbb{Z} : j \leq x, x \in \mathbb{R}\} \quad (\text{A.14})$$

Summe in Zweierschritten:

$$\sum_{j=n}^{N(2)} a_j = a_n + a_{n+2} + \dots + a_{N-2} + a_N \quad (\text{A.15})$$

Spezielles Summationssymbol:

$$\sum_{n > n_l > n_{l+1} > \dots > n_{l+k-1}} = \sum_{n_l=0}^{n-1} \sum_{n_{l+1}=0}^{n_l-1} \dots \sum_{n_{l+k-1}=0}^{n_{l+k-2}-1} \quad (\text{A.16})$$

für positive k and l . Leere Summen werden als Null angenommen.

Gauß'sche hypergeometrische Funktion [234, S. 37]:

$${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j (b)_j}{(c)_j} \frac{z^j}{j!} \quad (\text{A.17})$$

Konfluente hypergeometrische Funktion [234, S. 262]:

$${}_1F_1(a; b; z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j z^j}{(b)_j j!} \quad (\text{A.18})$$

Verallgemeinerte hypergeometrische Funktion [234, S. 37]:

$${}_pF_q(a_1, \dots, a_p; b_1, \dots, b_q; z) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a_1)_j \dots (a_p)_j z^j}{(b_1)_j \dots (b_q)_j j!} \quad (\text{A.19})$$

Bessel-Funktion erster Art [234, S. 65]:

$$J_\nu(z) = \frac{z^\nu}{2^\nu \Gamma(\nu + 1)} {}_0F_1(\nu + 1; -z^2/4) \quad (\text{A.20})$$

Bessel-Funktion zweiter Art [234, S. 66]:

$$Y_\nu(z) = \frac{\cos(\pi\nu)J_\nu(z) - J_{-\nu}(z)}{\sin(\pi\nu)} \quad (\text{A.21})$$

Hankel-Funktionen [234, S. 66]:

$$\begin{aligned} H_\nu^{(1)}(z) &= J_\nu(z) + iY_\nu(z) \\ H_\nu^{(2)}(z) &= J_\nu(z) - iY_\nu(z) \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Modifizierte Bessel-Funktion erster Art [234, S. 66]:

$$I_\nu(z) = \frac{z^\nu}{2^\nu \Gamma(\nu + 1)} {}_0F_1(\nu + 1; z^2/4) \quad (\text{A.23})$$

Modifizierte Bessel-Funktion zweiter Art [234, S. 66]:

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)}{\sin(\pi\nu)} \quad (\text{A.24})$$

Reduzierte Bessel-Funktion [334, S. 275, Gl. (3.1)]:

$$\hat{k}_\nu(z) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} z^\nu K_\nu(z) \quad (\text{A.25})$$

Verallgemeinertes Laguerre-Polynom [234, S. 240]:

$$L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(\alpha + 1)_n}{n!} {}_1F_1(-n; \alpha + 1; x) \quad (\text{A.26})$$

Jacobi-Polynom [234, S. 212]:

$$P_n^{(\alpha, \beta)}(x) = (-1)^n \binom{n + \beta}{n} {}_2F_1(-n, \alpha + \beta + n + 1; \beta + 1; (1 + x)/2) \quad (\text{A.27})$$

Gegenbauer-Polynom [234, S. 220]:

$$C_n^\lambda(x) = \frac{\Gamma(n+2\lambda)}{n!\Gamma(2\lambda)} {}_2F_1(-n, n+2\lambda; \lambda+1/2; (1-x)/2) \quad (\text{A.28})$$

Legendre-Polynom [234, S. 229]:

$$P_n(x) = \frac{d^n}{dx^n} \frac{(x^2-1)^n}{2^n n!} = {}_2F_1(-n, n+1; 1; (1-x)/2) \quad (\text{A.29})$$

Zugeordnete Legendre-Funktionen [257, S. 1325]:

$$\begin{aligned} P_\ell^{|m|}(x) &= (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{|m|}}{dx^{|m|}} P_\ell(x) = (1-x^2)^{|m|/2} \frac{d^{\ell+|m|}}{dx^{\ell+|m|}} \frac{(x^2-1)^\ell}{2^\ell \ell!} = \\ &= \frac{(\ell+|m|)!(1-x^2)^{|m|/2}}{2^{|m|}|m|!(\ell-|m|)!} {}_2F_1(|m|-\ell, |m|+\ell+1; |m|+1, (1-x)/2), \\ & \quad (-1 \leq x \leq 1) \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Kugelflächenfunktion [366, S. 3, Gl. (1.2-1)]:

$$Y_\ell^m(\theta, \phi) = i^{m+|m|} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!} \right]^{1/2} P_\ell^{|m|}(\cos \theta) \exp(im\phi) \quad (\text{A.31})$$

Reguläre Kugelfunktion:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_\ell^m(\vec{r}) &= r^\ell Y_\ell^m(\theta, \phi) \\ &= \left[\frac{2\ell+1}{4\pi} (\ell+m)!(\ell-m)! \right]^{1/2} \sum_{j \geq 0} \frac{(-x-iy)^{m+j} (x-iy)^j z^{\ell-m-2j}}{2^{2j+m} (j+m)! j! (\ell-m-2j)!} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Irreguläre Kugelfunktion:

$$\mathcal{Z}_\ell^m(\vec{r}) = r^{-\ell-1} Y_\ell^m(\theta, \phi) \quad (\text{A.33})$$

A.3 Differentialoperatoren

Bessel-Operator:

$$D_z = \frac{1}{z} \frac{d}{dz}; \quad D_z^n = (D_z)^n \quad (\text{A.34})$$

Partielle Ableitung:

$$\partial_j = \frac{\partial}{\partial x_j}; \quad \partial_j^n = (\partial_j)^n \quad (\text{A.35})$$

Laplace-Operator im n -dimensionalen Raum:

$$\Delta = \sum_{j=1}^n \partial_j^2 \quad (\text{A.36})$$

Nabla-Operator:

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{R}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial R_1} \\ \frac{\partial}{\partial R_2} \\ \frac{\partial}{\partial R_3} \end{pmatrix} \quad (\text{A.37})$$

A.4 Exponentialartige Basisfunktionen

Slater-Funktionen (STO's; [327], [121, S. 2, Gl. (2.1)]):

$$\chi_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = (\alpha r)^{n-1} \exp(-\alpha r) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad n \in \mathbb{N} \quad (\text{A.38})$$

B-Funktionen [121, S. 2, Gl. (2.14)]:

$$B_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = [2^{n+\ell}(n+\ell)!]^{-1} \hat{k}_{n-1/2}(\alpha r) \mathcal{Y}_\ell^m(\alpha \vec{r}) \quad (\text{A.39})$$

A-Funktionen [122, S. 2728, Gl. (3.4)]:

$$\Lambda_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = \alpha^{3/2} \mathcal{N}(n, \ell) L_{n-\ell-1}^{(2\ell+2)}(2\alpha r) \exp(-\alpha r) \mathcal{Y}_\ell^m(2\alpha \vec{r}) \quad (\text{A.40})$$

$$\mathcal{N}(n, \ell) = \left[8 \frac{(n-\ell-1)!}{(n+\ell+1)!} \right]^{1/2} \quad (\text{A.41})$$

Coulomb-Sturmians [367]:

$$\Psi_{n,\ell}^m(\alpha, \vec{r}) = (2\alpha)^{3/2} \left[\frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!} \right]^{1/2} L_{n-\ell-1}^{(2\ell+1)}(2\alpha r) \exp(-\alpha r) \mathcal{Y}_\ell^m(2\alpha \vec{r}) \quad (\text{A.42})$$

A.5 Stieltjes-Reihen

Eine besonders für theoretische Aussagen bedeutsame Klasse von Reihen sind die Stieltjes-Reihen. Eine Stieltjes-Reihe ist eine formale Entwicklung der Form

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \mu_n z^n. \quad (\text{A.43})$$

Die Koeffizienten μ_n sind die Momente eines eindeutig gegebenen, positiven Maßes $\psi(t)$, $t \in [0, \infty)$:

$$\mu_n = \int_0^{\infty} t^n d\psi(t), \quad n \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{A.44})$$

Formal kann die Stieltjes-Reihe mit einem Stieltjes-Integral der Form

$$f(z) = \int_0^{\infty} \frac{d\psi(t)}{1+zt}, \quad |\arg(z)| < \pi \quad (\text{A.45})$$

identifiziert werden. Wenn ein solches Stieltjes-Integral für eine Funktion f existiert, dann nennt man eine solche Funktion eine Stieltjes-Funktion. Zu jeder Stieltjes-Funktion gibt es genau eine asymptotische Stieltjes-Reihe (A.43), gleichmäßig in jedem Sektor $|\arg(z)| < \theta$ für alle $\theta < \pi$. Zu jeder Stieltjes-Reihe können jedoch mehrere verschiedene zugehörige Stieltjes-Funktionen existieren. Um Eindeutigkeit zu garantieren, braucht man zusätzliche Kriterien. Wichtig im Bereich der Konvergenzbeschleunigung und der Summation divergenter Folgen ist die Tatsache, daß für festes z die Reste einer Stieltjes-Reihe betragsmäßig durch den ersten Term der Reihe abgeschätzt werden können, der in der jeweiligen Partialsumme nicht mehr berücksichtigt wurde. Folglich gilt für Stieltjes-Reihen die Restabschätzung

$$\omega_n = (-1)^{n+1} \mu_{n+1} z^{n+1} \quad (\text{A.46})$$

streng. Dies entspricht aber der Wahl $\omega_n = \Delta s_n$, also den \tilde{t} -Varianten.

Anhang B

Einige Lemmas

Lemma B.1

Setze für $n \in \mathbb{N}_0$

$$q_n^{(k)} = \frac{s_n^{(k+1)} - s}{s_n^{(k)} - s}, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (\text{B.1a})$$

$$b_n^{(k)} = \frac{s_n^{(k)} - s}{\omega_n^{(k)}}, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (\text{B.1b})$$

$$e_n^{(k)} = 1 - \frac{\omega_{n+1}^{(k)}}{\omega_n^{(k)}}, \quad k \in \mathbb{N}_0, \quad (\text{B.1c})$$

mit $s_n^{(k)}$ und $\omega_n^{(k)}$ aus Gl. (3.24). Dann folgt:

a) Es gilt $b_n^{(k)} = N_n^{(k)} - s D_n^{(k)}$ und

$$b_n^{(k+1)} = \nabla_n^{(k)} b_n^{(k)} = (\Delta b_n^{(k)}) / \delta_n^{(k)}. \quad (\text{B.2})$$

b) Die $q_n^{(k)}$ können mittels der folgenden Formeln berechnet werden:

$$q_n^{(k)} = \frac{-\omega_{n+1}^{(k)} b_n^{(k+1)}}{\Delta \omega_n^{(k)} b_n^{(k)}} \delta_n^{(k)} = \frac{1}{\omega_n^{(k)} / \omega_{n+1}^{(k)} - 1} \frac{b_n^{(k+1)}}{b_n^{(k)}} \delta_n^{(k)} = \frac{\omega_{n+1}^{(k)} / \omega_n^{(k)}}{e_n^{(k)}} \frac{b_n^{(k+1)}}{b_n^{(k)}} \delta_n^{(k)} \quad (\text{B.3})$$

c) Es gilt

$$\frac{\omega_{n+1}^{(k+1)}}{\omega_n^{(k+1)}} = \frac{\delta_{n+1}^{(k)} \omega_{n+2}^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)} - \omega_n^{(k)}}{\delta_n^{(k)} \omega_{n+1}^{(k)} \omega_n^{(k)} \omega_{n+2}^{(k)} - \omega_{n+1}^{(k)}} \quad (\text{B.4a})$$

$$= \frac{\omega_{n+2}^{(k)} \delta_{n+1}^{(k)} e_n^{(k)}}{\omega_{n+1}^{(k)} \delta_n^{(k)} e_{n+1}^{(k)}} \quad (\text{B.4b})$$

und folglich auch

$$e_n^{(k+1)} = 1 - \frac{\delta_{n+1}^{(k)} e_n^{(k)}}{\delta_n^{(k)} e_{n+1}^{(k)}} (1 - e_{n+1}^{(k)}). \quad (\text{B.5})$$

d) Gleichung (3.154) gilt.

Beweis:

a) Als direkte Folgerung aus Gl. (3.38) und der Definition (B.1b) ergibt sich $b_n^{(k)} = N_n^{(k)} - s D_n^{(k)}$. Damit folgt Gl. (B.2), da sowohl $N_n^{(k)}$ als auch $D_n^{(k)}$ die Rekursion $X_n^{(k+1)} = \nabla_n^{(k)} X_n^{(k)}$ erfüllen, wie aus Gl. (3.41) folgt.

b) In Definition (B.1a) substituiere man $s_n^{(k)} - s = b_n^{(k)} \omega_n^{(k)}$ und $s_n^{(k+1)} - s = b_n^{(k+1)} \omega_n^{(k+1)}$. Im Resultat $q_n^{(k)} = [b_n^{(k+1)}/b_n^{(k)}] [\omega_n^{(k+1)}/\omega_n^{(k)}]$ benutzt man Gl. (3.24), um $\omega_n^{(k+1)}/\omega_n^{(k)}$ zu berechnen. Gleichung (B.3) folgt.

c) Gleichungen (B.4a) und (B.4b) folgen sofort aus Gl. (3.24) und den Definitionen.

d) Anwendung der Formel

$$\frac{u_k}{u_0} = \prod_{l=0}^{k-1} \frac{u_{l+1}}{u_l} \quad (\text{B.6})$$

mit $u_l = s_n^{(l)} - s$ führt auf eine Darstellung von $[s_n^{(k)} - s]/[s_n - s]$ als ein Produkt der $q_n^{(l)}$, und folglich kann b) benutzt werden. Das Resultat kann man dann durch erneute Anwendung von Gl. (B.6) mit $u_l = b_n^{(l)}$ vereinfacht werden.

□

Lemma B.2

Es gelte Annahme (B-2) von Satz 3.15. Dann existiert der Grenzwert

$$E_k = \lim_{n \rightarrow \infty} e_n^{(k)} = 1 - \Omega_k \neq 1. \quad (\text{B.7})$$

Ferner gilt das folgende:

a) Ist $\Omega_k \neq 1$ und demnach $E_k \neq 0$ für alle k , dann gilt

$$\Omega_k = F_{k-1} \Omega_{k-1} = \Omega_0 / \Phi_k, \quad (\text{B.8a})$$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \prod_{l=0}^{k-1} \frac{\omega_{n+1}^{(l)} / \omega_n^{(l)}}{e_n^{(l)}} = \frac{[\Omega_0]^k}{\prod_{l=0}^{k-1} (\Phi_l - \Omega_0)}. \quad (\text{B.8b})$$

Gleichung (B.8b) folgt auch aus $\Omega_0 \notin \{\Phi_0 = 1, \Phi_1, \dots, \Phi_{k-1}\}$.

b) Gilt $\Omega_k = 1$ und folglich $E_k = 0$ für alle k , dann gilt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{e_{n+1}^{(k)}}{e_n^{(k)}} = F_k, \quad k \in \mathbb{N}_0. \quad (\text{B.9})$$

Wenn umgekehrt Gl. (B.9) gilt, dann impliziert $\Omega_0 = 1$ die Gültigkeit von $\Omega_k = 1$ und folglich von $E_k = 0$ für alle k .

c) Ist $\Omega_k = 1$ für alle k , dann gilt

$$\left\{ \prod_{l=0}^{k-1} \left[\frac{\omega_{n+1}^{(l)}}{e_n^{(l)} \omega_n^{(l)}} \right] \right\} \rightarrow \left\{ \prod_{l=0}^{k-1} e_n^{(l)} \right\}^{-1} \quad (\text{B.10})$$

für $n \rightarrow \infty$.

Beweis:

a) Aufgrund der Annahmen geht $e_n^{(k)}/e_{n+1}^{(k)}$ gegen $E_k/E_k = 1$ für $n \rightarrow \infty$. Der erste Teil von Gl. (B.8a) ist demnach eine direkte Konsequenz von Gl. (B.4b). Zum Beweis des zweiten Teils iteriert man die erste Teilgleichung mit dem Zwischenresultat

$$\Omega_k = F_{k-1} F_{k-2} \dots F_0 \Omega_0 \quad (\text{B.11})$$

und verwendet darin schließlich die Definition (3.63) für die Φ_k . Aus Gl. (B.8a) folgt

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\omega_{n+1}^{(l)}/\omega_n^{(l)}}{e_n^{(l)}} = \frac{\Omega_l}{1 - \Omega_l} = \frac{\Omega_0}{\Phi_l - \Omega_0}. \quad (\text{B.12})$$

Jetzt ergibt sich Gl. (B.8b) durch Produktbildung über l . Die letzte Aussage folgt daraus, daß $\Omega_0 \notin \{\Phi_0 = 1, \Phi_1, \dots, \Phi_{k-1}\}$ zusammen mit Gl. (B.8a) impliziert, daß $\Omega_l \neq 1$ und folglich $E_l \neq 0$ für $l \in \{0, 1, \dots, k-1\}$ gilt. Also darf man Grenzwerte wie in Gl. (B.8b) nehmen.

b) Dies folgt für $n \rightarrow \infty$ in Gl. (B.4b).

c) Dies folgt aus der Definition der Ω_k .

□

Lemma B.3

a) Wenn Gl. (3.165) für $l = k$ mit $a_k^{(1)} \neq 0$ gilt und wenn

$$\frac{\delta_{n+1}^{(k)}}{\delta_n^{(k)}} = 1 + \frac{d_k^{(1)}}{n + \beta} + \frac{d_k^{(2)}}{(n + \beta)^2} + O((n + \beta)^{-3}), \quad n \rightarrow \infty, \quad (\text{B.13})$$

gilt, dann gilt

$$e_n^{(k+1)} = \frac{a_k^{(1)} - 1 - d_k^{(1)}}{n + \beta} + \frac{a_k^{(2)} + a_k^{(1)} d_k^{(1)} - d_k^{(1)} - d_k^{(2)} - a_k^{(2)}/a_k^{(1)}}{(n + \beta)^2} + O((n + \beta)^{-3}) \quad (\text{B.14})$$

für große n , und folglich gilt

$$a_{k+1}^{(1)} = a_k^{(1)} - 1 - d_k^{(1)}, \quad a_{k+1}^{(2)} = a_k^{(2)} + a_k^{(1)} d_k^{(1)} - d_k^{(1)} - d_k^{(2)} - a_k^{(2)}/a_k^{(1)}. \quad (\text{B.15})$$

b) Gilt

$$\delta_n^{(k)} = \Delta(n + \beta + (p - 1)k)^{-1}, \quad (\text{B.16})$$

dann folgt

$$d_k^{(1)} = -2, \quad d_k^{(2)} = 2(2 + (p - 1)k), \quad (\text{B.17})$$

und

$$a_k^{(1)} = a_0^{(1)} + k. \quad (\text{B.18})$$

c) Gilt für Konstanten $u_k^{(0)} \neq 0$ und $u_k^{(1)}$

$$\omega_n^{(k)} = (n + \beta)^{-\alpha_k} \left(u_k^{(0)} + \frac{u_k^{(1)}}{n + \beta} + O((n + \beta)^{-2}) \right), \quad n \rightarrow \infty, \quad (\text{B.19})$$

dann folgt

$$e_n^{(k)} = \frac{\alpha_k}{n + \beta} - \frac{\alpha_k(\alpha_k + 1)/2 - u_k^{(1)}/u_k^{(0)}}{(n + \beta)^2} + O((n + \beta)^{-3}) \quad (\text{B.20})$$

für große n und folglich gilt

$$a_k^{(1)} = \alpha_k, \quad a_k^{(2)} = \alpha_k(\alpha_k + 1)/2 - u_k^{(1)}/u_k^{(0)}. \quad (\text{B.21})$$

Beweis:

a) Dies folgt durch einfache Umformungen aus Gl. (B.5).

b) Dies ergibt sich durch Reihenentwicklung von $\delta_{n+1}^{(k)}/\delta_n^{(k)}$ in $(n + \beta)^{-1}$ und aus Gl. (B.15).

c) Dies ergibt sich aus der Definition von $e_n^{(k)}$ durch Reihenentwicklung in $(n + \beta)^{-1}$.

□

Anhang C

Eine asymptotisch verwandte Reihe

Wir untersuchen, welche Reihen zur Taylor-Reihe (9.11) im Sinne von Kummer asymptotisch verwandt sind, also Terme mit gleichem asymptotischen Verhalten für große Laufindizes haben. Eine solche Reihe ist in Gleichung (9.32) gegeben. Diese ist allerdings in geschlossener Form nicht einfach auszurechnen, weshalb nach einfacheren Reihen gleicher Asymptotik gesucht wird, die man über bekannte Funktionen leicht ausrechnen kann. Wir zeigen, daß die Reihe

$$\hat{s} = \frac{\gamma'/\pi}{x_0^2 + \gamma'^2} (\pi\gamma^2)^{1/2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-Y/[\pi\gamma])^m \Gamma(m + 3/2)}{m! (m + 2)!} \quad (\text{C.1})$$

mit Partialsummen (9.33) diese Bedingung erfüllt. Vom Vorfaktor wird im folgenden zur Vereinfachung abgesehen.

Wir stellen fest, daß die Reihe (9.32) das gleiche Konvergenzverhalten wie die Reihe

$$\sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-2z)^m}{m! m^{3/2}} \quad (\text{C.2})$$

für $z = Y/[2\pi\gamma]$ aufweist. Unter Verwendung der asymptotischen Relation

$$\frac{\Gamma(z + a)}{\Gamma(z + b)} \sim z^{a-b}, \quad z \rightarrow \infty, \quad (\text{C.3})$$

kann man mit gleicher Berechtigung auch das Konvergenzverhalten der Reihe

$$s = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-2z)^m}{m!} \frac{\Gamma(m + \alpha)}{\Gamma(m + \alpha + 3/2)} \quad (\text{C.4})$$

für beliebiges $\alpha > 0$ betrachten. Die Terme dieser Reihe sind für jede Wahl von α eine asymptotische Näherung der Terme der Reihe (9.32) und damit auch — bis auf einen konstanten Faktor — eine asymptotische Näherung der Terme der Taylor-Reihe (9.11).

Im Falle $\alpha = 3/2$ kann man diese Reihe gemäß [289, p. 126, Theorem 43, p. 116, Eq. (1), p. 24, Eq. (2)]:

$$\begin{aligned}
 s &= \frac{\Gamma(3/2)}{\Gamma(3)} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-2z)^m (3/2)_m}{m! (3)_m} \\
 &= 4^{-1} \pi^{1/2} {}_1F_1(3/2; 3; -2z) \\
 &= 4^{-1} \pi^{1/2} \exp(-z) {}_0F_1(-; 2; z^2/4) \\
 &= 4^{-1} \pi^{1/2} \exp(-z) \Gamma(2) \frac{2}{z} I_1(z) \\
 &= \frac{\pi^{1/2}}{2z} \exp(-z) I_1(z)
 \end{aligned} \tag{C.5}$$

durch die modifizierte Bessel-Funktion $I_1(z)$ erster Art der Ordnung 1 ausdrücken. Die Berechnung dieser Bessel-Funktion ist aber ein Standardproblem und mit Programmen aus der NAG-Bibliothek möglich. Damit ist alles gezeigt.

Anhang D

Eine Implementierung der \mathcal{H} -Transformation: GTRLEV

Das folgende Unterprogramm ist eine FORTRAN 77 DOUBLE PRECISION Implementierung der \mathcal{H} -Transformation aus Gl. (5.16) für die Beschleunigung von Fourier-Reihen. Das Programm stützt sich auf die Implementierung aus Abschnitt 5.1.6. Die Größe ALPHA entspricht $2 \cos(\alpha)$, während SOFN und OMOFN den neuen Inputdaten s_n und ω_n (bzw. c_1 aus dem Beispiel (5.56)) entsprechen. Der Einfachheit halber wird $\beta = 1$ in dem Programm zugrundegelegt. Die Zähler- und Nennersummen in Gl. (5.16) werden über die Rekursion (5.22) berechnet und in zwei eindimensionalen Feldern AN und AZ wie in Abschnitt 5.1.6 beschrieben abgespeichert. Im Programm sind keine Vorkehrungen gegen ein Verschwinden des Nenners getroffen worden. Das Programm muß in der folgenden Weise angewandt werden: Die Werte von s_n und ω_n mit $n = 0, 1, 2, \dots$ müssen in einer Schleife im aufrufenden Programm berechnet werden. Nach jeder Berechnung von einem Paar (s_n, ω_n) muß das Unterprogramm GTRLEV aufgerufen werden. Es berechnet einen Schätzwert SEST für den Limes (oder Antilimes) der Reihe unter Verwendung von Gl. (5.23). In dem gegebenen Unterprogramm wird keine Konvergenzanalyse vorgenommen. Dies muß im aufrufenden Programm durchgeführt werden.

Es sei bemerkt, daß im Falle der \mathcal{I} -, der \mathcal{J} - und \mathcal{K} -Transformation ähnlich einfache Programme existieren, die allerdings aus Platzgründen nicht in die Arbeit aufgenommen wurden.

```

SUBROUTINE GTRLEV(ALPHA,N,SOFN,OMOFN,NMAX,AZ,AN,EVEN,SEST)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
  LOGICAL EVEN
  DIMENSION AZ(0:NMAX),AN(0:NMAX)
  IF(N.EQ.0) THEN
    EVEN = .TRUE.
  ENDIF
  AN(N) = 1.DO / OMOFN / DBLE(N+1)
  AZ(N) = SOFN * AN(N)
  DO 100 K=1, N/2, 1
    M      = N - 2 * K
    M1     = M + 1
    M2     = M + 2
    M1K    = M1 + K
    M1K2   = M1K + K
    DM1    = DBLE(M1)
    DM1K   = DBLE(M1K)
    DM1K2  = DBLE(M1K2)
    AN(M) = DM1 * AN(M) + DM1K2 * AN(M2) - ALPHA * AN(M1) * DM1K
    AZ(M) = DM1 * AZ(M) + DM1K2 * AZ(M2) - ALPHA * AZ(M1) * DM1K
  100 CONTINUE
  IF(EVEN) THEN
    SEST = AZ(0) / AN(0)
  ELSE
    SEST = AZ(1) / AN(1)
  END IF
  EVEN = .NOT. EVEN
  RETURN
END

```

Anhang E

Verwendung mehrerer Störungsreihen zur Berechnung von effektiven charakteristischen Polynomen: Eine Maple-Fallstudie

In diesem Abschnitt wird gezeigt, daß man das Computeralgebrasystem Maple [72, 73, 74] verwenden kann, um ein effektives charakteristisches Polynom $P_2(E)$ der Form (6.27) aus den Störungsreihen

$$E_1 = \sum_{j=0}^{\infty} E_{1,j} \beta^j, \quad E_2 = \sum_{j=0}^{\infty} E_{2,j} \beta^j \quad (\text{E.1})$$

zweier nichtentarteter Eigenwerte E_1 und E_2 zu bestimmen.¹ Zur Bestimmung der fünf unbekanntenen Koeffizienten benötigt man fünf Gleichungen, die man über die beiden Bedingungen

$$P_2 \left(\sum_{j=0}^{\infty} E_{1,j} \beta^j \right) = O(\beta^3) \quad (\text{E.2})$$

und

$$P_2 \left(\sum_{j=0}^{\infty} E_{2,j} \beta^j \right) = O(\beta^2) \quad (\text{E.3})$$

erhalten kann. Ist das effektive charakteristische Polynom bekannt, stellen seine beiden Nullstellen \tilde{E}_1 und \tilde{E}_2 Näherungen für die gesuchten Eigenwerte dar. Man beachte, daß diese beiden Nullstellen unter Maple als E_1 und E_2 bezeichnet werden.

Diese Bedingungen wurden unter Maple V Release 3 implementiert. Man beachte, daß die beiden gesuchten Nullstellen unter Maple als E_1 und E_2 bezeichnet werden. Der

¹Diese sollten nicht mit den Termen der Störungsreihe des Grundzustandes verwechselt werden. Die Terme der Störungsreihen tragen hier zwei Indizes.

folgende Text dieses Anhangs wurde aus dem Maple-Worksheet als L^AT_EX-Quelle exportiert und nur geringfügig modifiziert.

```
> restart;
```

Wir definieren das effektive charakteristische Polynom in Abhängigkeit von n , E und β :

```
> P:=(n,E,beta)->
> sum('E^j*sum('f.n.j.k*beta^k','k'=0..n-j)','j'=0..n);
```

$$P := (n, E, \beta) \rightarrow \sum_{j=0}^n E^j \left(\sum_{k=0}^{n-j} f.n.j.k \beta^k \right)$$

Wir definieren einige Konstanten:

```
> n:=2;N:=n*(n+3)/2;N.1:=3;N.2:=2;f.n.n.0:=1;
      n := 2
      N := 5
      N1 := 3
      N2 := 2
      f220 := 1
```

Das effektive charakteristische Polynom wird für die erste Störungsreihe nach Taylor bis zur zweiten Ordnung in β expandiert:

```
> ppp.1:=convert(
>     simplify(
>         taylor(
>             P(n,sum('E[1,1]*beta^l','l'=0..N),beta),
>             beta,
>             N.1)
>         ),
>     polynom);
```

$$\begin{aligned} ppp1 := & f200 + E_{1,0} f210 + E_{1,0}^2 \\ & + (f201 + E_{1,0} f211 + E_{1,1} f210 + 2 E_{1,0} E_{1,1}) \beta \\ & + (f202 + E_{1,1} f211 + E_{1,2} f210 + 2 E_{1,0} E_{1,2} + E_{1,1}^2) \beta^2 \end{aligned}$$

Nullsetzen der Koeffizienten liefert drei Gleichungen für die f 's:

```
> for a from 0 to N.1-1
>     do
>         eq.a:=coeff(ppp.1,beta,a)=0;
>     od;
      eq0 := f200 + E_{1,0} f210 + E_{1,0}^2 = 0
```

$$eq1 := f201 + E_{1,0} f211 + E_{1,1} f210 + 2 E_{1,0} E_{1,1} = 0$$

$$eq2 := f202 + E_{1,1} f211 + E_{1,2} f210 + 2 E_{1,0} E_{1,2} + E_{1,1}^2 = 0$$

Das effektive charakteristische Polynom wird für die zweite Störungsreihe nach Taylor bis zur ersten Ordnung in β expandiert:

```
> ppp.2:=convert(
>     simplify(
>         taylor(P(n,sum('E[2,1]*beta^1','1'=0..N),beta),
>             beta,
>             N.2)
>     ),
>     polynom);
```

$$ppp2 := f200 + E_{2,0}^2 + E_{2,0} f210$$

$$+ (f201 + E_{2,0} f211 + E_{2,1} f210 + 2 E_{2,0} E_{2,1}) \beta$$

Nullsetzen der Koeffizienten liefert zwei weitere Gleichungen für die f 's:

```
> for a from N.1 to N.2+N.1-1
>     do
>         eq.a:=coeff(ppp.2,beta,a-N.1)=0;
>     od;
```

$$eq3 := f200 + E_{2,0}^2 + E_{2,0} f210 = 0$$

$$eq4 := f201 + E_{2,0} f211 + E_{2,1} f210 + 2 E_{2,0} E_{2,1} = 0$$

Diese fünf Gleichungen werden gelöst,

```
> solve({eq.(0..N-1)},{seq(seq(f.n.j.k,k=0..n-j),j=0..n-1)});
```

und dann den f 's zugewiesen:

```
> assign("");
```

$$\left\{ \begin{array}{l} f211 = -E_{2,1} - E_{1,1}, f202 = E_{1,2} E_{2,0} + E_{1,1} E_{2,1} - E_{1,0} E_{1,2}, \\ f201 = E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0} E_{2,1}, f210 = -E_{2,0} - E_{1,0}, \\ f200 = E_{2,0} E_{1,0} \end{array} \right\}$$

Es ergibt sich dann als effektives charakteristisches Polynom 2. Grades:

```
> PP:=simplify(P(n,x,beta));
```

$$PP := E_{2,0} E_{1,0} + \beta E_{1,1} E_{2,0} + \beta E_{1,0} E_{2,1} + \beta^2 E_{1,2} E_{2,0} \\ + \beta^2 E_{1,1} E_{2,1} - \beta^2 E_{1,0} E_{1,2} - x E_{2,0} - x E_{1,0} - x E_{2,1} \beta \\ - x E_{1,1} \beta + x^2$$

Die beiden Nullstellen werden berechnet und in einer Liste abgespeichert:

```
> solu:=simplify([solve(PP,x)]);
```

$$solu := \left[\frac{1}{2} E_{2,0} + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} \beta + \frac{1}{2} E_{1,1} \beta + \frac{1}{2} (E_{2,0}^2 \\ - 2 E_{2,0} E_{1,0} + 2 E_{2,0} E_{2,1} \beta - 2 \beta E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 \\ - 2 \beta E_{1,0} E_{2,1} + 2 E_{1,0} E_{1,1} \beta + E_{2,1}^2 \beta^2 - 2 \beta^2 E_{1,1} E_{2,1} \\ + E_{1,1}^2 \beta^2 - 4 \beta^2 E_{1,2} E_{2,0} + 4 \beta^2 E_{1,0} E_{1,2})^{1/2}, \frac{1}{2} E_{2,0} \\ + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} \beta + \frac{1}{2} E_{1,1} \beta - \frac{1}{2} (E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} \\ + 2 E_{2,0} E_{2,1} \beta - 2 \beta E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 - 2 \beta E_{1,0} E_{2,1} \\ + 2 E_{1,0} E_{1,1} \beta + E_{2,1}^2 \beta^2 - 2 \beta^2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 \beta^2 \\ - 4 \beta^2 E_{1,2} E_{2,0} + 4 \beta^2 E_{1,0} E_{1,2})^{1/2} \right]$$

Vereinfachung der Taylorreihe der ersten Lösung zeigt, daß dadurch die Störungsreihe von E_2 bis zur ersten Ordnung reproduziert wird: ²

```
> assume(e.2.0>e.1.0):
```

```
> subs(e.1.0=E[1,0],e.2.0=E[2,0],
```

```
> simplify(
```

```
> taylor(
```

```
> subs(E[2,0]=e.2.0,E[1,0]=e.1.0,solu[1]),
```

```
> beta,N
```

```
> )
```

```
> )
```

```
> );
```

$$E_{2,0} + E_{2,1} \beta - E_{1,2} \beta^2 + \frac{(-E_{2,1} + E_{1,1}) E_{1,2}}{-E_{2,0} + E_{1,0}} \beta^3 - E_{1,2}$$

²Wir nehmen dabei an, daß die ungestörten Energien eine bestimmte energetische Ordnung haben und müssen aus technischen Gründen bestimmte Ersetzungen von Konstanten vornehmen, die jeweils nach der Vereinfachung wieder rückgängig gemacht werden.

$$\frac{(-E_{1,0} E_{1,2} - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{2,0} E_{1,2} + E_{2,1}^2 + E_{1,1}^2)}{E_{1,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} + E_{2,0}^2} \beta^4 + O(\beta^5)$$

Vereinfachung der Taylorreihe der zweiten Lösung zeigt, daß dadurch die Störungsreihe von E_1 bis zur zweiten Ordnung reproduziert wird:

```
> subs(e.1.0=E[1,0],e.2.0=E[2,0],
>       simplify(
>           taylor(
>               subs(E[2,0]=e.2.0,E[1,0]=e.1.0,solu[2]),
>               beta,N
>           )
>       )
> );
```

$$\frac{E_{1,0} + E_{1,1} \beta + E_{1,2} \beta^2 - \frac{(E_{2,1} - E_{1,1}) E_{1,2}}{E_{2,0} - E_{1,0}} \beta^3 + E_{1,2}}{(E_{1,2} E_{2,0} + E_{2,1}^2 - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 - E_{1,0} E_{1,2}) / (E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} + E_{1,0}^2)} \beta^4 + O(\beta^5)$$

Dies muß nach Konstruktion auch so sein.

Schließlich werden die beiden Näherungen für die Energien mit Kopplungskonstante $\beta = 1$ ausgewertet:

```
> E[1]=simplify(subs(beta=1,solu[2]));
> E[2]=simplify(subs(beta=1,solu[1]));
```

$$E_1 = \frac{1}{2} E_{2,0} + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} + \frac{1}{2} E_{1,1} - \frac{1}{2} (E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} + 2 E_{2,0} E_{2,1} - 2 E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 - 2 E_{1,0} E_{2,1} + 2 E_{1,0} E_{1,1} + E_{2,1}^2 - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 - 4 E_{1,2} E_{2,0} + 4 E_{1,0} E_{1,2})^{1/2}$$

$$E_2 = \frac{1}{2} E_{2,0} + \frac{1}{2} E_{1,0} + \frac{1}{2} E_{2,1} + \frac{1}{2} E_{1,1} + \frac{1}{2} (E_{2,0}^2 - 2 E_{2,0} E_{1,0} + 2 E_{2,0} E_{2,1} - 2 E_{1,1} E_{2,0} + E_{1,0}^2 - 2 E_{1,0} E_{2,1} + 2 E_{1,0} E_{1,1} + E_{2,1}^2 - 2 E_{1,1} E_{2,1} + E_{1,1}^2 - 4 E_{1,2} E_{2,0} + 4 E_{1,0} E_{1,2})^{1/2}$$

Literaturverzeichnis

- [1] ABOUN, N. (1985): Etude et Réalisation d'un Logiciel Vectorisé du GRG avec Estimation de la Précision de la Solution. Implementation de l' ϵ -Algorithme Vectoriel pour l'Accélération de la Convergence. Thèse 3ème cycle, Université de Paris VI.
- [2] ABRAMOWITZ, M. UND STEGUN, I. (1970): *Handbook of Mathematical Functions*. Dover Publications, Inc., New York.
- [3] ABRAMOWITZ, M. UND STEGUN, I. A. (1972): *Handbook of mathematical functions*. National Bureau of Standards, Washington D. C.
- [4] AITKEN, A. C. (1926): On Bernoulli's numerical solution of algebraic equations, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* **46**, 289–305.
- [5] ALMLÖF, J. (1994): Notes on Hartree-Fock theory and related topics. In ROOS, B. O. (Hrsg.), *Lecture Notes in Quantum Chemistry II*, Band 64, Reihe *Lecture Notes in Chemistry*, S. 1–90. Springer-Verlag, Berlin.
- [6] AMOS, A. T. (1970): Feenberg-Goldhammer procedure and geometric approximation in Hartree-Fock perturbation theory, *J. Chem. Phys.* **52**, 603–605.
- [7] ANDRÉ, J.-M. (1975): Ab initio and semi-empirical bandstructure calculations on polymers. In ANDRÉ, J.-M. UND LADIK, J. (Hrsg.), *Electronic Structure of Polymers and Molecular Crystals*, Band 9, Reihe *NATO ASI Series B*, S. 1–21, New York, London. Plenum Publ. Corp.
- [8] ANDRÉ, J.-M. (1980): Quantum mechanical methods for regular polymers, *Adv. Quantum Chem.* **12**, 65–102.
- [9] ANDRÉ, J.-M., BODART, V. P., J. BRÉDAS, J.-L. D. UND FRIPIAT, J. G. (1984): Towards specific ab initio programs for polymer calculations. In LADIK, J., ANDRÉ, J.-M. UND SEEL, M. (Hrsg.), *Quantum chemistry of polymers – solid state aspects*, Band 123, Reihe *NATO ASI Series C*, S. 1–21. Reidel, Dordrecht.
- [10] ANDRÉ, J.-M., GOUVERNEUR, L. UND LEROY, G. (1967): L'étude théorique des systèmes périodiques. I La méthode LCAO-HCO, *Int. J. Quantum Chem.* **1**, 427–450.

- [11] ANDRÉ, J.-M., GOUVERNEUR, L. UND LEROY, G. (1967): L'étude théorique des systèmes périodiques. II La méthode LCAO-SCF-CO, *Int. J. Quantum Chem.* **1**, 451–461.
- [12] ARTECA, G. A., FERNÁNDEZ, F. M. UND CASTRO, E. A. (1990): *Large order perturbation theory and summation methods in quantum mechanics*. Springer-Verlag, Berlin.
- [13] BACHRACH, S. M. (1994): Population Analysis and Electron Densities from Quantum Mechanics. In BOYD, D. B. UND LIPKOWITZ, K. B. (Hrsg.), *Reviews in Computational Chemistry*, Band 5, S. 171–227. VCH Publishers, New York.
- [14] BAKER, JR., G. A. (1965): The theory and application of the Padé approximant method, *Adv. Theor. Phys.* **1**, 1–58.
- [15] BAKER, JR., G. A. (1975): *Essentials of Padé approximants*. Academic Press, New York.
- [16] BAKER, JR., G. A. UND GRAVES-MORRIS, P. (1981): *Padé approximants. Part I: Basic theory*. Addison-Wesley, Reading, Mass.
- [17] BAKER, JR., G. A. UND GRAVES-MORRIS, P. (1981): *Padé approximants. Part II: Extensions and applications*. Addison-Wesley, Reading, Mass.
- [18] BARNETT, M. P. (1963): The evaluation of molecular integrals by the zeta-function expansion. In ALDER, B., FERNBACH, S. UND ROTENBERG, M. (Hrsg.), *Methods in computational physics 2: Quantum mechanics*, S. 95–153. Academic Press, New York.
- [19] BARNETT, M. P. UND COULSON, C. A. (1951): The evaluation of integrals occurring in the theory of molecular structure. Part I & II, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **243**, 221–249.
- [20] BARTLETT, R. J. (1981): Many-body perturbation theory and coupled cluster theory for electron correlation in molecules, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **32**, 359–401.
- [21] BARTLETT, R. J., DYKSTRA, C. E. UND PALDUS, J. (1984): Coupled cluster methods for molecular calculations. In DYKSTRA, C. E. (Hrsg.), *Advanced theories and computational approaches to the electronic structure of molecules*, S. 127–159. Reidel, Dordrecht.
- [22] BARTLETT, R. J., SEKINO, H. UND PURVIS, G. D. (1983): Comparison of MBPT and coupled-cluster methods with full CI. Importance of triplet excitations and infinite summations, *Chem. Phys. Lett.* **98**, 66–71.
- [23] BASZENSKI, G. UND DELVOS, F.-J. (1988): Error estimates for sine series expansions, *Math. Nachr.* **139**, 155–166.

- [24] BASZENSKI, G., DELVOS, F.-J. UND TASCHE, M. (1995): A united approach to accelerating trigonometric expansions, *Computers Math. Applic.* **30**, 33–49.
- [25] BAUSCHLICHER, JR., C. W., LANGHOFF, S. R., TAYLOR, P. R., HANDY, N. C. UND KNOWLES, P. J. (1986): Benchmark full configuration-interaction calculations on HF and NH₂, *J. Chem. Phys.* **85**, 1469–1474.
- [26] BAUSCHLICHER, JR., C. W. UND TAYLOR, P. R. (1986): Benchmark full configuration interaction calculations on H₂O, F, and F⁻, *J. Chem. Phys.* **85**, 2779–2783.
- [27] BAUSCHLICHER, JR., C. W. UND TAYLOR, P. R. (1986): A full CI treatment of the ¹A₁ – ³B₁ separation in methylene, *J. Chem. Phys.* **85**, 6510–6512.
- [28] BAYLY, C. I., CIEPLAK, P., CORNELL, W. D. UND KOLLMAN, P. A. (1993): A well-behaved electrostatic potential based method using charge-restraints for deriving charges: The RESP model, *J. Phys. Chem.* **97**, 10269–10280.
- [29] BENDER, C. M. UND ORSZAG, S. A. (1978): *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*. McGraw-Hill, New York.
- [30] BENDER, C. M. UND ORSZAG, S. A. (1987): *Advanced mathematical methods for scientists and engineers*. McGraw-Hill, Singapore.
- [31] BHATTACHARYYA, K. (1981): Geometric approximation in Rayleigh–Schrödinger perturbation theory, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **14**, 783–793.
- [32] BISHOP, D. M. (1967): Single-center molecular wave functions, *Adv. Quantum Chem.* **3**, 25–59.
- [33] BISHOP, R. F. (1991): An overview of coupled cluster theory and its applications in physics, *Theor. Chim. Acta* **80**, 95–148.
- [34] BJØRSTAD, P., DAHLQUIST, G. UND GROSSE, E. (1981): Extrapolations of asymptotic expansions by a modified Aitken δ^2 -formula, *BIT* **21**, 56–65.
- [35] BOARD, JR., J. A., CAUSEY, J. W., LEATHRUM, JR., J. F., WINDEMUTH, A. UND SCHULTEN, K. (1992): Accelerated molecular dynamics simulation with the parallel fast multipole algorithm, *Chem. Phys. Lett.* **198**, 89–94.
- [36] BONHAM, R. A., PEACHER, J. L., UND COX, JR., H. L. (1964): On the calculation of multicenter two-electron repulsion integrals involving Slater functions, *J. Chem. Phys.* **40**, 3083–3086.
- [37] BOUFERGUENE, A. UND FARES, M. (1994): Some convergence aspects of the one-center expansion method, *Int. J. Quantum Chem.* **51**, 345–356.

- [38] BOUFERGUENE, A. UND RINALDI, D. (1994): A new single-center method to compute molecular integrals of quantum chemistry in Slater-type orbital basis of functions, *Int. J. Quantum Chem.* **50**, 21–42.
- [39] BOWEN, J. P. UND ALLINGER, N. L. (1991): Molecular Mechanics: The Art and Science of Parameterization. In Boyd und Lipkowitz [40], S. 81–97.
- [40] BOYD, D. B. UND LIPKOWITZ, K. B. (Hrsg.) (1991): *Reviews in Computational Chemistry*, Band 2. VCH Publishers, New York.
- [41] BOYD, J. P. (1995): A lag-averaged generalization of Euler's method for accelerating series, *Appl. Math. Comput.* **72**, 143–166.
- [42] BRACKEN, P. (1994): *Interpolant Polynomials in Quantum Mechanics and Study of the One Dimensional Hubbard Model*. PhD thesis, University of Waterloo.
- [43] BRACKEN, P. UND ČÍŽEK, J. (1994): Construction of interpolant polynomials for approximating eigenvalues of a Hamiltonian which is dependent on a coupling constant, *Phys. Lett. A* **194**, 337–342.
- [44] BRACKEN, P. UND ČÍŽEK, J. (1995): Investigation of the ${}^1E_{2g}^-$ states in cyclic polyenes, *Int. J. Quantum Chem.* **53**, 467–471.
- [45] BRACKEN, P. UND ČÍŽEK, J. (1996): Interpolant polynomial technique applied to the PPP Model. I. Asymptotics for excited states of cyclic polyenes in the finite cyclic Hubbard model, *Int. J. Quantum Chem.* **57**, 1019–1032.
- [46] BREZINSKI, C. (1971): Accélération de suites convergence logarithmique, *C. R. Acad. Sc. Paris* **273 A**, 727 – 730.
- [47] BREZINSKI, C. (1971): Application de l' ϵ -algorithme à la résolution des systèmes non linéaires, *C. R. Acad. Sc. Paris* **271 A**, 1174–1177.
- [48] BREZINSKI, C. (1975): Généralisation de la transformation de Shanks, de la table de Padé et de l' ϵ -algorithme, *Calcolo* **12**, 317–360.
- [49] BREZINSKI, C. (1975): Numerical stability of a quadratic method for solving systems of nonlinear equations, *Computing* **14**, 205–211.
- [50] BREZINSKI, C. (1977): *Accélération de la convergence en analyse numérique*. Springer-Verlag, Berlin.
- [51] BREZINSKI, C. (1978): *Algorithmes d'accélération de la convergence – Étude numérique*. Éditions Technip, Paris.
- [52] BREZINSKI, C. (1980): A general extrapolation algorithm, *Numer. Math.* **35**, 175–180.

- [53] BREZINSKI, C. (1980): *Padé-type approximation and general orthogonal polynomials*. Birkhäuser, Basel.
- [54] BREZINSKI, C. (1988): A new approach to convergence acceleration methods. In CUYT, A. (Hrsg.), *Nonlinear numerical methods and rational approximation*, S. 373–405. Reidel, Dordrecht.
- [55] BREZINSKI, C. (1988): Quasi-linear extrapolation processes. In AGARWAL, R. P. ET AL. (Hrsg.), *Numerical Mathematics, Singapore 1988*, Band 86, Reihe *International Series of Numerical Mathematics*, S. 373–405. Birkhäuser, Basel.
- [56] BREZINSKI, C. (1991): *A bibliography on continued fractions, Padé approximation, extrapolation and related subjects*. Prensas Universitarias de Zaragoza, Zaragoza.
- [57] BREZINSKI, C. (Hrsg.) (1991): *Continued fractions and Padé approximants*. North-Holland, Amsterdam.
- [58] BREZINSKI, C. UND MATOS, A. C. (im Druck): A derivation of extrapolation algorithms based on error estimates, *J. Comput. Appl. Math.* Publication ANO-319, Laboratoire d'Analyse Numérique et d'Optimisation, Université des Sciences et Technologie de Lille, 1993.
- [59] BREZINSKI, C. UND REDIVO ZAGLIA, M. (1991): *Extrapolation methods. Theory and practice*. North-Holland, Amsterdam.
- [60] BREZINSKI, C. UND REDIVO ZAGLIA, M. (1994): A general extrapolation algorithm revisited, *Adv. Comput. Math.* **2**, 461–477.
- [61] BREZINSKI, C. UND REDIVO ZAGLIA, M. (1994): Hybrid procedures for solving linear systems, *Numer. Math.* **67**, 1–19.
- [62] BREZINSKI, C. UND REDIVO ZAGLIA, M. (1994): On the kernel of sequence transformations, *Appl. Numer. Math.* **16**, 239–244.
- [63] BREZINSKI, C. UND SADOK, H. (1992): Some vector sequence transformations with applications to systems of equations, *Numer. Algor.* **3**, 75–80.
- [64] BREZINSKI, C. UND SALAM, A. (im Druck): Matrix and vector sequence transformations revisited, *Proc. Royal Soc. Edinburgh*. Publication ANO-324, Laboratoire d'Analyse Numérique et d'Optimisation, Université des Sciences et Technologie de Lille, 1994.
- [65] BREZINSKI, C. UND WALZ, G. (1991): Sequences of transformations and triangular recursion schemes, *J. Comput. Appl. Math.* **34**, 361–383.
- [66] BRIGHAM, E. O. (1974): *The Fast Fourier Transform*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs.

- [67] BUCKINGHAM, A. (1978): Basic theory of intermolecular forces: Applications to small molecules. In PULLMAN, B. (Hrsg.), *Intermolecular Interactions: From Diatomics to Biopolymers*, S. 1–67. Wiley.
- [68] CABAY, S. UND JACKSON, L. W. (1976): A polynomial extrapolation method for finding limits and antilimits of vector sequences, *SIAM J. Numer. Anal.* **13**, 734–752.
- [69] CARLSON, H., NGUYEN, T., OROZCO, M. UND JORGENSEN, W. (1993): Accuracy of free energies of hydration for organic molecules from 6-31g(d)- derived partial charges, *J. Comput. Chem.* **14**, 1240–1249.
- [70] CARRIER, J., GREENGARD, L. UND ROKHLIN, V. (1988): A fast adaptive multipole algorithm for particle simulations, *SIAM J. Sci. Statist. Comput.* **9**, 669–686.
- [71] CASTELHANO, A. L. UND GRILLER, D. (1982): Heats of formation of some simple alkyl radicals, *J. Am. Chem. Soc.* **104**, 3655–3659.
- [72] CHAR, B. W., GEDDES, K. O., GONNET, G. H., LEONG, B. L., MONAGAN, M. B. UND WATT, S. M. (1991): *Maple V language reference manual*. Berlin.
- [73] CHAR, B. W., GEDDES, K. O., GONNET, G. H., LEONG, B. L., MONAGAN, M. B. UND WATT, S. M. (1991): *Maple V library reference manual*. Berlin.
- [74] CHAR, B. W., GEDDES, K. O., GONNET, G. H., LEONG, B. L., MONAGAN, M. B. UND WATT, S. M. (1992): *First leaves: A tutorial introduction to Maple V*. Springer-Verlag, Berlin.
- [75] ČÍŽEK, J. (1966): On the correlation problem in atomic and molecular systems. calculation of wavefunction components in ursell-type expansion using quantum-field theoretical methods, *J. Chem. Phys.* **45**, 4256–4266.
- [76] ČÍŽEK, J. (1969): On the use of the cluster expansion and the technique of diagrams in calculations of correlation effects in atoms and molecules, *Adv. Chem. Phys.* **14**, 35–89.
- [77] ČÍŽEK, J. UND BRACKEN, P. (1996): Interpolant polynomial technique applied to the PPP model. II. Testing the interpolant technique on the Hubbard model, *Int. J. Quantum Chem.* **57**, 1033–1048.
- [78] ČÍŽEK, J., VINETTE, F. UND WENIGER, E. J. (1991): Examples on the use of symbolic computation in physics and chemistry: Applications of the inner projection technique and of a new summation method for divergent series, *Int. J. Quantum Chem. Symp.* **25**, 209–223.
- [79] ČÍŽEK, J., WENIGER, E. J., BRACKEN, P. UND ŠPIRKO, V. (1996): Effective characteristic polynomials and two-point Padé approximants as summation techniques for the strongly divergent perturbation expansions of the ground state energies of anharmonic oscillators, *Phys. Rev. E* **53**, 2925–2939.

- [80] COMMITTEE ON MATHEMATICAL CHALLENGES FROM COMPUTATIONAL CHEMISTRY, BOARD ON MATHEMATICAL SCIENCES, BOARD ON CHEMICAL SCIENCES AND TECHNOLOGY, COMMISSION ON PHYSICAL SCIENCES, MATHEMATICS, AND APPLICATIONS (1995): *Mathematical Challenges from Theoretical/Computational Chemistry*. National Academy Press, Washington, D.C.
- [81] CONDON, E. U. UND SHORTLEY, G. H. (1970): *The theory of atomic spectra*. Cambridge U. P., Cambridge.
- [82] COOPE, I. D. UND GRAVES-MORRIS, P. R. (1993): The rise and the fall of the vector epsilon algorithm, *Numer. Algo.* **5**, 275–286.
- [83] CORNELL, W. D., CIEPLAK, P., BAYLY, C. I. UND KOLLMAN, P. A. (1993): Application of RESP charges to calculation conformational energies, hydrogen bond energies, and free energies of solvation., *J. Am. Chem. Soc.* **115**, 9620–9631.
- [84] CSASZAR, P. UND PULAY, P. (1984): Geometry optimization by direct inversion in the iterative subspace, *J. Mol. Struct.* **114**, 31–34.
- [85] DAVIS, M. E. (1994): Erratum: The inducible multipole solvation model: A new model for solvation effects on solute electrostatics, *J. Chem. Phys.* **101**, 3414(E).
- [86] DAVIS, M. E. (1994): The inducible multipole solvation model: A new model for solvation effects on solute electrostatics, *J. Chem. Phys.* **100**, 5149–5159.
- [87] DECKER, J. : Private Mitteilung.
- [88] DECKER, J. (1995): Polarisationsgradspektroskopie an spektralen Löchern. Diplomarbeit, Universität Regensburg.
- [89] DELAHAYE, J. P. UND GERMAIN-BONNE, B. (1980): Résultats négatifs en accélération de la convergence, *Numer. Math.* **35**, 443–457.
- [90] DELHALLE, J., PIELA, L., BRÉDAS, J.-L. UND ANDRÉ, J.-M. (1980): Multipole expansion in tight-binding Hartree-Fock calculations for infinite model polymers, *Phys. Rev. B* **22**, 6254 – 6267.
- [91] DICK, B. (1988): High-contrast polarization spectroscopy of photochemically burned spectral holes in amorphous solids: Potential for fast optical storage, *Chem. Phys. Lett.* **143**, 186–192.
- [92] DIETZ, K., SCHMIDT, C. UND WARKEN, M. (1995): Description of excitation processes induced by short laser pulses in low-dimensional effective spaces of Floquet states, *J. Chem. Phys.* **102**, 1716–1721.
- [93] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1992): A comparative study of standard and non-standard mean-field theories for the energy, the first and the second moments of Be and LiH, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25**, 1705–1718.

- [94] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1993): The acceleration of convergence of many-body perturbation theory: unlinked-graph shift in Møller-Plesset perturbation theory, *Chem. Phys. Lett.* **207**, 281–286.
- [95] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1993): On the acceleration of many-body perturbation theory: I. General theory, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 1885–1896.
- [96] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1993): On the acceleration of many-body perturbation theory: II. Benchmark checks for small systems, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26**, 1897–1914.
- [97] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1994): Explicit construction of convergent MBPT for the $^1\Delta$ state of C_2 and the H_2 ground state at large bond distance, *Chem. Phys. Lett.* **220**, 397–404.
- [98] DIETZ, K., SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HESS, B. A. (1994): Systematic construction of efficient many-body perturbation series, *J. Chem. Phys.* **100**, 7421–7428.
- [99] DINESEN, T. R. J. UND SANCTUARY, B. C. (1994): Relaxation of anisotropically oriented $I=3/2$ nuclei in the multipole basis. Evolution of the second rank tensor in the double quantum filtered NMR experiment, *J. Chem. Phys.* **101**, 7372–7380.
- [100] DINUR, U. UND HAGLER, A. T. (1991): New Approaches to Empirical Force Fields. In Boyd und Lipkowitz [40], S. 99–164.
- [101] DOWNING, J. W., MICHL, J., ČÍŽEK, J. UND PALDUS, J. (1979): Multidimensional interpolation by polynomial roots, *Chem. Phys. Lett.* **67**, 377–380.
- [102] DRESCHER, W. (1992): *Untersuchungen photochemischer Reaktionen mit Hilfe der Lochbrenn-Spektroskopie*. Doktorarbeit, Universität Göttingen, Göttingen.
- [103] DRESCHER, W. UND DICK, B. (1994): Saturation of depth and polarization of resonant and satellite spectral holes generated with pulsed laser excitation, *J. Phys. Chem.* **98**, 2899–2907.
- [104] DRUMMOND, J. E. (1976): Summing a common type of slowly convergent series of positive terms, *J. Austral. Math. Soc.* **B 19**, 416–421.
- [105] DRUMMOND, J. E. (1984): Convergence speeding, convergence, and summability, *J. Comput. Appl. Math.* **11**, 145 – 159.
- [106] DUFFY, E., SEVERANCE, D. UND JORGENSEN, W. (1993): Urea: Potential functions, $\log P$, and free energy of hydration, *Isr. J. Chem.* **33**, 323–330.

- [107] DUPUIS, M., LESTER, JR., W. A., LENGFIELD, III, B. H. UND B. LIU (1983): Formaldehyde: Ab initio MCSCF+CI transition state for $\text{H}_2\text{CO} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2$ on the S_0 surface, *J. Chem. Phys.* **79**, 6117–6173.
- [108] ECKHOFF, K. S. (1995): Accurate reconstructions of functions of finite regularity from truncated Fourier series expansions, *Math. Comp.* **64**, 671–690.
- [109] EDDY, R. P. (1979): Extrapolation to the limit of a vector sequence. In WANG, P. C. C. (Hrsg.), *Information Linkage Between Applied Mathematics and Industry*, S. 387–396. Academic Press, New York.
- [110] ERDÉLYI, A., MAGNUS, W., OBERHETTINGER, F. UND TRICOMI, F. G. (1953): *Higher transcendental functions*, Band II. McGraw-Hill, New York.
- [111] FEENBERG, E. (1956): Invariance property of the Brillouin-Wigner perturbation series, *Phys. Rev.* **103**, 1116–1119.
- [112] FERNÁNDEZ RICO, J. (1993): Long-range multicenter integrals with Slater functions: Gauss transform-based methods, *J. Comput. Chem.* **14**, 1203–1211.
- [113] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R., PANIAGUA, M. UND FERNÁNDEZ-ALONSO, J. I. (1986): Atomic partitioning of two-center potentials for Slater basis, *Int. J. Quantum Chem.* **29**, 1155–1164.
- [114] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R., PANIAGUA, M. UND RAMÍREZ, G. (1991): Calculation of two-center one-electron molecular integrals with STOs, *Comput. Phys. Commun.* **64**, 329–342.
- [115] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1989): Molecular integrals with Slater basis. I General approach, *J. Chem. Phys.* **91**, 4204–4212.
- [116] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1989): Molecular integrals with Slater basis. II Fast computational algorithms, *J. Chem. Phys.* **91**, 4213–4222.
- [117] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1991): Molecular integrals with Slater basis. III Three center nuclear attraction integrals, *J. Chem. Phys.* **94**, 5032–5039.
- [118] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1992): Molecular integrals with Slater basis. IV Ellipsoidal coordinate methods for three-center nuclear attraction integrals, *J. Chem. Phys.* **97**, 7613–7622.
- [119] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1992): Molecular integrals with Slater functions: One-center expansion methods. In FRAGA, S. (Hrsg.), *Computational chemistry: Structure, interactions and reactivity. Part A*, S. 241–272, Amsterdam. Elsevier.

- [120] FERNÁNDEZ RICO, J., LÓPEZ, R., RAMÍREZ, G. UND FERNÁNDEZ-ALONSO, J. I. (1993): Auxiliary functions for Slater molecular integrals, *Theor. Chim. Acta* **85**, 101–107.
- [121] FILTER, E. UND STEINBORN, E. O. (1978): Extremely compact formulas for molecular one-electron integrals and Coulomb integrals over Slater-type atomic orbitals, *Phys. Rev. A* **18**, 1 – 11.
- [122] FILTER, E. UND STEINBORN, E. O. (1980): A matrix representation of the translation operator with respect to a basis of exponentially declining functions, *J. Math. Phys.* **21**, 2725 – 2736.
- [123] FORD, W. F. UND SIDI, A. (1987): An algorithm for a generalization of the Richardson extrapolation process, *SIAM J. Numer. Anal.* **24**, 1212–1232.
- [124] FORD, W. F. UND SIDI, A. (1988): Recursive algorithms for vector extrapolation methods, *Appl. Numer. Math.* **4**, 477–489.
- [125] FÖRNER, W. (1992): Formulation of the coupled-cluster theory with localized orbitals in correlation calculations on polymers, *Int. J. Quantum Chem.* **43**, 221–250.
- [126] FÖRNER, W. (eingereicht): The properties of the iterative solution of the inverse Dyson equation in the correlation problem, *J. Comput. Phys.*
- [127] FRIEDMAN, H. L. (1985): *A Course in Statistical Mechanics*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs.
- [128] FULDE, P. (1991): *Electron correlation in atoms and molecules*. Springer-Verlag, Berlin.
- [129] GEERTSEN, J., ERIKSEN, S. UND ODDERSHEDE, J. (1991): Some aspects of the coupled cluster based polarization propagator method, *Adv. Quantum Chem.* **22**, 167–209.
- [130] GELLER, M. (1963): Two-center integrals over solid spherical harmonics, *J. Chem. Phys.* **39**, 84–89.
- [131] GERMAIN-BONNE, B. (1973): Transformations de suites, *Rev. Française Automat. Informat. Rech. Operat.* **7 (R-1)**, 84–90.
- [132] GOLDHAMMER, P. UND FEENBERG, E. (1956): Refinement of the Brillouin-Wigner perturbation method, *Phys. Rev.* **101**, 1233–1234.
- [133] GOLUB, G. H. UND VAN LOAN, C. F. (1989): *Matrix Computations*. The John Hopkins University Press, Baltimore.

- [134] GOTTLIEB, D. UND ORSZAG, S. A. (1977): *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia.
- [135] GRAVES-MORRIS, P. R. (Hrsg.) (1972): *Padé approximants*. The Institute of Physics, London.
- [136] GRAVES-MORRIS, P. R. (Hrsg.) (1973): *Padé approximants and their applications*. Academic Press, London.
- [137] GRAVES-MORRIS, P. R. (1983): Vector valued rational interpolants I, *Numer. Math.* **42**, 331–348.
- [138] GRAVES-MORRIS, P. R. (1992): Extrapolation methods for vector sequences, *Numer. Math.* **61**, 475–487.
- [139] GRAVES-MORRIS, P. R. (1994): A review of Padé methods for the acceleration of convergence of a sequence of vectors, *Appl. Numer. Math.* **15**, 153–174.
- [140] GRAVES-MORRIS, P. R. UND SAFF, E. B. (1991): An extension of a row convergence theorem for vector Padé approximants, *J. Comput. Appl. Math.* **34**, 315–324.
- [141] GRAVES-MORRIS, P. R., SAFF, E. B. UND VARGA, R. S. (Hrsg.) (1984): *Rational approximation and interpolation*. Springer-Verlag, Berlin.
- [142] GREENGARD, L. (1988): *The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems*. MIT Press, Cambridge, Mass.
- [143] GREENGARD, L. UND ROKHLIN, V. (1987): A fast algorithm for particle simulations, *J. Comput. Phys.* **73**, 325–348.
- [144] GREENGARD, L. UND ROKHLIN, V. (1988): Rapid evaluation of potential fields in three dimensions. In ANDERSON, C. UND GREENGARD, C. (Hrsg.), *Vortex Methods*, Band 1360, Reihe *Lecture Notes in Mathematics*, S. 121–141. Springer-Verlag, Berlin.
- [145] GROTENDORST, J. UND STEINBORN, E. O. (1985): The Fourier transform of a two-center product of exponential-type functions and its efficient evaluation, *J. Comput. Phys.* **61**, 195 – 217.
- [146] GROTENDORST, J. UND STEINBORN, E. O. (1986): Use of nonlinear convergence accelerators for the efficient evaluation of GTO molecular integrals, *J. Chem. Phys.* **84**, 5617–5623.
- [147] GROTENDORST, J. UND STEINBORN, E. O. (1988): Numerical evaluation of molecular one- and two-center multicenter integrals with exponential-type orbitals via the Fourier-transform method, *Phys. Rev. A* **38**, 3857–3876.

- [148] GROTENDORST, J., WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1986): Efficient evaluation of infinite-series representations for overlap, two-center nuclear attraction and Coulomb integrals using nonlinear convergence accelerators, *Phys. Rev. A* **33**, 3706 – 3726.
- [149] GUO-ZHONG, Z. (1993): Convergence and stability properties of a vector Padé extrapolation method, *J. Comput. Math.* **11**, 339.
- [150] HAMILTON, T. P. UND PULAY, P. (1986): Direct inversion in the iterative subspace (DIIS) optimization of open-shell, excited-state and small multiconfiguration SCF wave functions, *J. Chem. Phys.* **84**, 5728–5734.
- [151] HANDY, N. C. (1994): Full configuration interaction and Møller-Plesset theory. In MALLI, G. L. (Hrsg.), *Relativistic and Electron Correlation Effects in Molecules and Solids*, Band 318, Reihe *NATO ASI B*, S. 133–161. Plenum, New York, London.
- [152] HANDY, N. C., KNOWLES, P. J. UND SOMASUNDRAM, K. (1985): On the convergence of the Møller-Plesset perturbation series, *Theoret. Chim. Acta* **68**, 87–100.
- [153] HARRISON, R. J. UND HANDY, N. C. (1983): Full CI calculations on BH, H₂O, NH₃ and HF, *Chem. Phys. Lett.* **95**, 386–391.
- [154] HÅVIE, T. (1979): Generalized Neville type extrapolation schemes, *BIT* **19**, 204–213.
- [155] HENRICI, P. (1964): *Elements of Numerical Analysis*. Wiley, New York.
- [156] HILLION, P. (1975): Méthode d' Aitken itérée pour les suites oscillantes d' approximations, *C. R. Acad. Sc. Paris A* **280**, 1701–1704.
- [157] HOFFMANN, M. R. UND SCHAEFER III, H. F. (1986): A full coupled-cluster singles, doubles and triples model for the description of electron correlation, *Adv. Quantum Chem.* **18**, 207 – 279.
- [158] HOMEIER, H. H. H. (1990): *Integraltransformationen und Quadraturverfahren für Molekülintegrale mit B-Funktionen*, Band 121, Reihe *Theorie und Forschung*. S. Roderer Verlag, Regensburg. Zugleich: Doktorarbeit, Universität Regensburg.
- [159] HOMEIER, H. H. H. (1992): A Levin-type algorithm for accelerating the convergence of Fourier series, *Numer. Algo.* **3**, 245–254.
- [160] HOMEIER, H. H. H. (1994): A hierarchically consistent, iterative sequence transformation, *Numer. Algo.* **8**, 47–81.
- [161] HOMEIER, H. H. H. (1994): Nonlinear convergence acceleration for orthogonal series. In GRUBER, R. UND TOMASSINI, M. (Hrsg.), *Proceedings of the 6th Joint EPS-APS International Conference on Physics Computing, Physics Computing '94*,

- S. 47–50. European Physical Society, Boite Postale 69, CH-1213 Petit-Lancy, Genf, Schweiz. ISBN 2-88270-011-3
<http://rchs1.uni-regensburg.de/preprint.html#TC-NA-94-2>.
- [162] HOMEIER, H. H. H. (1994): Some applications of nonlinear convergence accelerators, *Int. J. Quantum Chem.* **45**, 545–562.
- [163] HOMEIER, H. H. H. (1995): Determinantal representations for the \mathcal{J} transformation, *Numer. Math.* **71**, 275–288.
- [164] HOMEIER, H. H. H. (im Druck): Analytical and numerical studies of the convergence behavior of the \mathcal{J} transformation, *J. Comput. Appl. Math.*
<http://rchs1.uni-regensburg.de/preprint.html#TC-NA-94-4>.
- [165] HOMEIER, H. H. H. (im Druck): Correlation energy estimators based on Møller-Plesset perturbation theory, *J. Mol. Struct. (Theochem)*.
<http://rchs1.uni-regensburg.de/preprint.html#TC-QM-96-1>.
- [166] HOMEIER, H. H. H. (im Druck): On convergence acceleration for the iterative solution of the inverse Dyson equation, *J. Mol. Struct. (Theochem)*. Proceedings of the 2nd Electronic Computational Chemistry Conference. Online:
<http://rchs1.uni-regensburg.de/ECCC/2/paper.18/index.html>.
- [167] HOMEIER, H. H. H. UND DICK, B. (1995): Zur Berechnung der Linienform spektraler Löcher, (Engl.: On the computation of the line shape of spectral holes). In *59. Physikertagung Berlin 1995, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*, Band 30, Reihe VI, S. 1815, Berlin. Physik-Verlag GmbH, D-69469 Weinheim. Zusammenfassung. Vollständige Fassung im Internet:
<http://rchs1.uni-regensburg.de/preprint.html#TC-PC-95-1>.
- [168] HOMEIER, H. H. H. UND DICK, B. (in Vorbereitung): Integrals in spectral hole burning theory. I. Formulas.
- [169] HOMEIER, H. H. H., RAST, S. UND KRIENKE, H. (1995): Iterative solution of the Ornstein-Zernike equation with various closures using vector extrapolation, *Comput. Phys. Commun.* **92**, 188–202.
- [170] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1990): Numerical integration of functions with a sharp peak at or near one boundary using Möbius transformations, *J. Comput. Phys.* **87**, 61–72.
- [171] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1991): Improved quadrature methods for three-center nuclear attraction integrals with exponential-type basis functions, *Int. J. Quantum Chem.* **39**, 625–645.

- [172] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1992): Improved quadrature methods for the Fourier transform of a two-center product of exponential-type basis functions, *Int. J. Quantum Chem.* **41**, 399–411.
- [173] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1992): On the evaluation of overlap integrals with exponential-type basis functions, *Int. J. Quantum Chem.* **42**, 761–778.
- [174] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1993): Programs for the evaluation of nuclear attraction integrals with B functions, *Comput. Phys. Commun.* **77**, 135–151.
- [175] HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (im Druck): Some properties of the coupling coefficients of real spherical harmonics and their relation to Gaunt coefficients, *J. Mol. Struct. (Theochem)*. Proceedings of the 2nd Electronic Computational Chemistry Conference. Online:
<http://rchs1.uni-regensburg.de/ECCC/2/paper.17/index.html>.
- [176] HOMEIER, H. H. H. UND WENIGER, E. J. (1995): On remainder estimates for Levin-type sequence transformations, *Comput. Phys. Commun.* **92**, 1–10.
- [177] HOMEIER, H. H. H., WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1992): Programs for the evaluation of overlap integrals with B functions, *Comput. Phys. Commun.* **72**, 269–287.
- [178] HOMEIER, H. H. H., WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1992): Simplified derivation of a one-range addition theorem of the Yukawa potential, *Int. J. Quantum Chem.* **44**, 405–411.
- [179] HOSE, G. UND KALDOR, U. (1979): Diagrammatic many-body perturbation theory for general model spaces, *J. Phys.* **B 12**, 3827–3855.
- [180] HOSE, G. UND KALDOR, U. (1982): Quasidegenerate perturbation theory, *J. Phys. Chem.* **86**, 2133–2140.
- [181] HOSE, G. (1989): Multi-reference-state Rayleigh-Schrödinger perturbation theory. In KALDOR, U. (Hrsg.), *Many-Body Methods in Quantum Chemistry. Proceedings of the Symposium, Tel Aviv University, 28-30 August, 1988*, Band 52, Reihe *Lecture Notes in Chemistry*, S. 43–64, Berlin, Heidelberg. Springer.
- [182] HUBAČ, I. UND ČÁRSKY, P. (1980): Correlation energy of open-shell systems. Application of the many-body Rayleigh-Schrödinger perturbation theory in the restricted Roothaan-Hartree-Fock formulation, *Phys. Rev. A* **22**, 2392–2399.
- [183] ISERLES, A. (1991): Complex dynamics of convergence acceleration, *IMA J. Numer. Anal.* **11**, 205–240.
- [184] JACKSON, J. D. (1962): *Classical Electrodynamics*. Wiley, New York.

- [185] JBILOU, K. UND SADOK, H. (1991): Some results about vector extrapolation methods and related fixed-point iterations, *J. Comput. Appl. Math.* **36**, 385–398.
- [186] JBILOU, K. UND SADOK, H. (1995): Analysis of some vector extrapolation methods for solving systems of linear equations, *Numer. Math.* **70**, 73–89.
- [187] JEZIORSKI, B. UND MONKHORST, H. (1981): Coupled-cluster method for multiterminantal reference states, *Phys. Rev. A* **24**, 1668–1681.
- [188] JONES, H. W. (1986): Computer-generated formulas for four-center integrals over Slater-type orbitals, *Int. J. Quantum Chem.* **29**, 177–183.
- [189] JONES, H. W. (1986): Exact formulas for multipole moments using Slater-type molecular orbitals, *Phys. Rev. A* **33**, 2081–2083.
- [190] JONES, H. W. (1987): Exact formulas and their evaluation for Slater-type orbital overlap integrals with large quantum numbers, *Phys. Rev. A* **35**, 1923–1926.
- [191] JONES, H. W. (1988): Analytical evaluation of multicenter molecular integrals over Slater-type orbitals using expanded Löwdin alpha function, *Phys. Rev. A* **38**, 1065–1068.
- [192] JONES, H. W. (1991): Analytic Löwdin alpha-function method for two-center electron-repulsion integrals over Slater-type orbitals, *J. Comput. Chem.* **12**, 1217–1222.
- [193] JONES, H. W. (1992): Löwdin α -function, overlap integral and computer algebra, *Int. J. Quantum Chem.* **41**, 749–754.
- [194] JONES, H. W. (1992): Semianalytical methods for four-center molecular integrals over Slater-type orbitals, *Int. J. Quantum Chem.* **42**, 779–784.
- [195] JONES, H. W. (1993): Benchmark values for two-center Coulomb integrals over Slater-type orbitals, *Int. J. Quantum Chem.* **45**, 21–30.
- [196] JONES, H. W. UND ETEMADI, B. (1993): Accurate ground state calculations of H_2^+ using basis sets of atom-centered Slater-type orbitals, *Phys. Rev. A* **47**, 3430 – 3432.
- [197] JONES, H. W., ETEMADI, B. UND BROWN, F. B. (1992): Restricted basis functions for H_2^+ with use of overlap integrals of Slater-type orbitals, *Int. J. Quantum Chem. Symp.* **26**, 265–270.
- [198] JONES, W. B. UND HARDY, G. (1970): Accelerating convergence of trigonometric expansions, *Math. Comp.* **24**, 547–560.
- [199] JORGENSEN, W. L. UND GAO, J. (1988): Cis-trans energy difference for the peptide bond in the gas phase and in aqueous solution, *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 4212–4216.

- [200] JORGENSEN, W. L., MADURA, J. UND SWENSON, C. (1984): Optimized intermolecular potential functions for liquid hydrocarbons, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 6638–6646.
- [201] JORGENSEN, W. L. UND SEVERANCE, D. (1990): Aromatic-aromatic interactions: Free energy profiles for the benzene dimer in water, chloroform, and liquid benzene, *J. Am. Chem. Soc.* **112**, 4768–4774.
- [202] JORGENSEN, W. L. UND TIRADO-RIVES, J. (1988): The OPLS potential functions for proteins. Energy minimizations for crystals of cyclic peptides and Crambin, *J. Am. Chem. Soc.* **110**, 1657–1666.
- [203] KADOR, L., SCHULTE, G. UND HAARER, D. (1986): Relation between hole-burning parameters and molecular parameters: Free-base phthalocyanine in polymer hosts, *J. Phys. Chem.* **90**, 1264–1270.
- [204] KARWOWSKI, J. (1992): The configuration interaction approach to electron correlation. In WILSON, S. UND DIERCKSEN, G. H. F. (Hrsg.), *Methods in computational molecular physics*, S. 65–98. Plenum Press, New York.
- [205] KAUFMANN, K. UND BAUMEISTER, W. (1989): Single-centre expansion of Gaussian basis functions and the angular decomposition of their overlap integrals, *J. Phys. B* **22**, 1–12.
- [206] KERR, J. A. (1973): Rate processes in the gas phase. In KOCHI, J. K. (Hrsg.), *Free Radicals*, Band 1, S. 1–36. Wiley, New York.
- [207] KHOVANSKII, A. N. (1963): *The application of continued fractions and their generalizations to problems in approximation theory*. Noordhoff, Groningen.
- [208] KIEFER, J. UND WEISS, G. H. (1981): A comparison of two methods for accelerating the convergence of Fourier series, *Comput. Math. Appl.* **7**, 527–535.
- [209] KNOPP, K. (1964): *Theorie und Anwendung der unendlichen Reihen*. Springer-Verlag, Berlin.
- [210] KNOWLES, P. J., ANDREWS, J. S., AMOS, R. D., HANDY, N. C. UND POPLE, J. A. (1991): Restricted Møller-Plesset theory for open-shell molecules, *Chem. Phys. Lett.* **186**, 130–136.
- [211] KÖSTER, A. M., KÖLLE, C. UND JUG, K. (1993): Approximation of molecular electrostatic potentials, *J. Chem. Phys.* **99**, 1224–1229.
- [212] KUCHARSKI, S. A., NOGA, J. UND BARTLETT, R. J. (1989): Fifth order many-body perturbation theory for molecular correlation energies, *J. Chem. Phys.* **90**, 7282–7290.

- [213] KUTZELNIGG, W. (1977): Pair correlation theories. In SCHAEFER III, H. F. (Hrsg.), *Methods of electronic structure theory*, S. 129–188. Plenum Press, New York.
- [214] KUTZELNIGG, W. (1994): *Einführung in die Theoretische Chemie.*, Band 2: Die Chemische Bindung. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, zweite Auflage.
- [215] KVASNIČKA, V., LAURINC, V. UND BISKUPIČ, S. (1982): Coupled-cluster approach in electronic structure theory of molecules, *Phys. Rep.* **90**, 159–202.
- [216] LABÍK, S., MALIJEVSKÝ, A. UND VOŇKA, P. (1985): A rapidly converging method of solving the OZ equation, *Mol. Phys.* **56**, 709–715.
- [217] LADIK, J., ANDRÉ, J.-M. UND SEEL, M. (Hrsg.) (1984): *Quantum chemistry of polymers – solid state aspects*. Reidel, Dordrecht.
- [218] LADIK, J. UND OTTO, P. (1993): Correlation corrected band structures of quasi 1d and 2d periodic systems and level distributions of disordered chains; New method with correlation for dynamic nonlinear properties of periodic polymers, *Int. J. Quantum Chem. Symp.* **27**, 111–129.
- [219] LADIK, J. L. (1988): *Quantum theory of polymers as solids*. Plenum Press, New York.
- [220] LAURENS, J. UND LE FERRAND, H. (1995): Fonctions d'itérations vectorielles, itérations rationnelles, *C. R. Acad. Sci. Paris* **321 I**, 631–636.
- [221] LE FERRAND, H. (1992): The quadratic convergence of the topological epsilon algorithm for systems of nonlinear equations, *Numer. Algor.* **3**, 273–284.
- [222] LEVIN, D. (1973): Development of non-linear transformations for improving convergence of sequences, *Int. J. Comput. Math. B* **3**, 371–388.
- [223] LEVIN, D. UND SIDI, A. (1981): Two new classes of nonlinear transformations for accelerating the convergence of infinite integrals and series, *Appl. Math. Comput.* **9**, 175–215.
- [224] LIEGENER, C.-M. (1985): Third-order many-body perturbation theory in the Møller-Plesset partitioning applied to an infinite alternating hydrogen chain, *J. Phys. C* **18**, 6011–6022.
- [225] LIEGENER, C.-M. (1988): *Ab initio* calculations of correlation effects in trans-polyacetylene, *J. Chem. Phys.* **88**, 6999–7004.
- [226] LIEGENER, C.-M. UND LADIK, J. (1987): *Ab initio* calculation of bent-chain models of solid hydrogen fluoride, *Phys. Rev. B* **35**, 6403–6408.
- [227] LIN, Y.-Y. UND HWANG, L.-P. (1992): Efficient computation of the matrix exponential using Padé approximation, *Computers Chem.* **16**, 285–293.

- [228] LINDGREN, I. (1974): The Rayleigh-Schrödinger perturbation and the linked-diagram theorem for a multi-configurational model space, *J. Phys.* **B 7**, 2441–2470.
- [229] LONGMAN, I. M. (1987): The summation of Fourier, Chebyshev, and Legendre series, *Appl. Math. Comput.* **23**, 61–70.
- [230] LÓPEZ, R. UND RAMÍREZ, G. (1994): Calculation of two-center exchange integrals with STOs using Möbius transformations, *Int. J. Quantum Chem.* **49**, 11–19.
- [231] LORENTZEN, L. UND WAADELAND, H. (1992): *Continued fractions with applications*. North-Holland, Amsterdam.
- [232] LÖWDIN, P. O. (1956): Quantum theory of cohesive properties of solids, *Advan. Phys.* **5**, 1–172.
- [233] MACLEOD, A. J. (1986): Acceleration of vector sequences by multi-dimensional Δ^2 methods, *Commun. Appl. Numer. Meth.* **2**, 385–392.
- [234] MAGNUS, W., OBERHETTINGER, F. UND SONI, R. P. (1966): *Formulas and theorems for the special functions of mathematical physics*. Springer-Verlag, New York.
- [235] MALIJEVSKÝ, A. UND LABÍK, S. (1987): The bridge function for hard spheres, *Mol. Phys.* **60**, 663–669.
- [236] MAPLE, J., HWANG, M.-J., STOCKFISCH, T., DINUR, U., WALDMAN, M., EWIG, C. UND HAGLER, A. (1994): Derivation of class II force fields. I. Methodology and quantum force field for the alkyl functional group and alkane molecules, *J. Comp. Chem.* **15**, 162–182.
- [237] MARTYNOV, G. A. UND SARKISOV, G. N. (1983): Exact equations and the theory of liquids. V, *Mol. Phys.* **49**, 1495–1504.
- [238] MASLOV, I. V., HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1995): Calculation of multicenter electron repulsion integrals in Slater-type basis sets using the Σ -separation method, *Int. J. Quantum Chem.* **55**, 9–22.
- [239] MATOS, A. C. (1989): *Constructions de Procédés d'Extrapolation à Partir de Développements Asymptotiques*. PhD thesis, Université de Lille I.
- [240] MATOS, A. C. (1990): Acceleration methods based upon convergence tests, *Numer. Math.* **58**, 329–340.
- [241] MATOS, A. C. (1990): A convergence acceleration method based upon a good estimation of the absolute value of the error, *IMA J. Numer. Anal.* **10**, 243–251.
- [242] MATOS, A. C. (1992): Convergence and acceleration properties for the vector ϵ -algorithm, *Numer. Algor.* **3**, 313–320.

- [243] MAYER, I. (1983): Charge, bond order and valence in the ab initio SCF theory, *Chem. Phys. Lett.* **97**, 270–274.
- [244] MAYER, I. (1984): Comment: Comment on the quantum theory of valence and bonding: Choosing between alternative definitions, *Chem. Phys. Lett.* **110**, 440–444.
- [245] MAYER, I. (1992): The LCAO representation of the first order density matrix in non-orthogonal basis sets: A note, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **255**, 1–7.
- [246] MCLEOD, J. B. (1971): A note on the ϵ -algorithm, *Computing* **7**, 17–24.
- [247] MCWEENY, R. (1992): The electron correlation problem. In WILSON, S. UND DIERCKSEN, G. H. F. (Hrsg.), *Methods in computational molecular physics*, S. 47–56. Plenum Press, New York.
- [248] MEISSNER, H. (1995): *Iterative Bestimmung der Elektronenkorrelation und der stationären Zustände elektronisch angeregter Moleküle sowie anharmonischer Oszillatoren mit Hilfe der verallgemeinerten Bloch-Gleichung*. Doktorarbeit, Universität Regensburg.
<http://www.chemie.uni-regensburg.de/preprint.html>.
- [249] MEŠINA, M. (1977): Convergence acceleration for the iterative solution of $x = Ax + f$, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **10**, 165–173.
- [250] MESSAOUDI, A. Matrix extrapolation algorithms. Publication ANO-328, Laboratoire d'Analyse Numérique et d'Optimisation, Université des Sciences et Technologie de Lille, 1994.
- [251] MESSAOUDI, A. (1994): Matrix recursive projection and interpolation algorithms, *Lin. Alg. Appl.* **202**, 71–89.
- [252] MIDY, P. (1992): Scaling transformations and extrapolation algorithms for vector sequences, *Comput. Phys. Commun.* **70**, 285–291.
- [253] MOLER, C. B. UND VAN LOAN, C. F. (1978): Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, *SIAM Rev.* **20**, 801–836.
- [254] MØLLER, C. UND PLESSET, M. (1934): Note on an approximation treatment for many-electron systems, *Phys. Rev.* **46**, 618–622.
- [255] MOMANY, F. UND RONE, R. (1992): Validation of the general purpose QUANTA 3.2/CHARMm force field, *J. Comp. Chem.* **13**, 888–900.
- [256] MOMANY, F., RONE, R., KUNZ, H., FREY, R. F., NEWTON, S. Q. UND SCHAFER, L. (1993): Geometry optimization, energetics, and solvation studies on four and five membered cyclic and disulfide bridged peptides, using the programs QUANTA3.3/CHARMm22, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **286**, 1–18.

- [257] MORSE, P. M. UND FESHBACH, H. (1953): *Methods of Theoretical Physics*. McGraw-Hill, New York.
- [258] MUKHERJEE, D. UND PAL, S. (1989): Use of cluster expansions in the open-shell correlation problem, *Adv. Quantum Chem.* **20**, 291–373.
- [259] MURPHY, R. B. UND MESSMER, R. P. (1994): Multiconfigurational perturbation theory. In MALLI, G. L. (Hrsg.), *Relativistic and Electron Correlation Effects in Molecules and Solids*, Band 318, Reihe *NATO ASI B*, S. 133–161. Plenum, New York, London.
- [260] NG, K.-C. (1974): Hypernetted chain solution for the classical one-component plasma up to $\gamma = 7000$, *J. Chem. Phys.* **61**, 2680–2689.
- [261] NICKEL, B. (1989): On the elimination of the polarization bias of the luminescence or transient absorption of photoexcited isotropic solutions, *J. Lumin.* **44**, 1–18.
- [262] NIEVERGELT, Y. (1991): Aitken's and Steffensen's accelerations in several variables, *Numer. Math.* **59**, 295–310.
- [263] NIKISHIN, E. M. UND SOROKIN, V. N. (1991): *Rational approximations and orthogonality*. American Mathematical Society, Providence, Rhode Island.
- [264] NOGA, J. UND BARTLETT, R. J. (1987): The full CCSDT model for molecular electronic structure, *J. Chem. Phys.* **86**, 7041–7050.
- [265] NOVOSADOV, B. K. (1983): Hydrogen-like atomic orbitals: Addition and expansion theorems, integrals, *Int. J. Quantum Chem.* **24**, 1–18.
- [266] O-OHATA, K. UND RUEDENBERG, K. (1966): Two-center Coulomb integrals between atomic orbitals, *J. Math. Phys.* **7**, 547–559.
- [267] ORTLOFF, H. (1986): Asymptotic behaviour and acceleration of vector sequences, *Numer. Math.* **49**, 545–559.
- [268] OSADA, N. (1990): A convergence acceleration method for some logarithmically convergent sequences, *SIAM J. Numer. Anal.* **27**, 178–189.
- [269] OSADA, N. (1991): Acceleration methods for vector sequences, *J. Comput. Appl. Math.* **38**, 361–371.
- [270] OSADA, N. (1992): Extensions of Levin's transformation to vector sequences, *Numer. Algor.* **2**, 121–132.
- [271] OTTO, P. : Integral, SCF-CO and Correlation Package (Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Friedrich-Alexander Universität, Erlangen).

- [272] PALDUS, J. (1974): Group theoretical approach to the configuration interaction and perturbation theory calculations for atomic and molecular systems, *J. Chem. Phys.* **61**, 5321–5330.
- [273] PALDUS, J. (1976): Many-electron correlation problem. A group theoretical approach. In EYRING, H. UND HENDERSON, D. (Hrsg.), *Theoretical Chemistry*, Band II, S. 131–290. Academic Press, New York.
- [274] PALDUS, J. (1988): Lie algebraic approach to the many-electron correlation problem. In TRUHLAR, D. G. (Hrsg.), *Mathematical frontiers in computational chemical physics*, S. 262–299. Springer-Verlag, Berlin.
- [275] PALDUS, J. (1992): Coupled cluster theory. In WILSON, S. UND DIERCKSEN, G. H. F. (Hrsg.), *Methods in computational molecular physics*, S. 99–194. Plenum Press, New York.
- [276] PALDUS, J., TAKAHASHI, M. UND CHO, R. W. H. (1984): Coupled-cluster approach to electron correlation in one dimension: Cyclic polyene model in delocalized basis, *Phys. Rev. B* **30**, 4267–4291.
- [277] PALMER, I. J. UND LADIK, J. (1994): New implementation of a program to calculate correlated band structures of polymers: An application to the band structure of polyparaphenylene (PPP), *J. Comput. Chem.* **15**, 814–819.
- [278] PAULI, M. UND ALDER, K. (1976): An addition theorem for the Coulomb function, *J. Phys. A* **9**, 905–929.
- [279] PEACOCK, T. E. UND MCWEENY, R. (1959): A self-consistent calculation of the graphite π band, *Proc. Phys. Soc.* **74**, 385–394.
- [280] PEREVOZCHIKOV, V. I., MASLOV, I. V., NIUKKANEN, A. W., HOMEIER, H. H. H. UND STEINBORN, E. O. (1992): On the combination of two methods for the calculation of multicenter integrals using STO and B function basis sets, *Int. J. Quantum Chem.* **44**, 45–57.
- [281] PEREZ-JORDA, J. M. UND YANG, W. (im Druck): A concise redefinition of the solid spherical harmonics and its use in fast multipole methods, *J. Chem. Phys.*
- [282] PETERSEN, H. G., SOELVASON, D., PERRAM, J. W. UND SMITH, E. R. (1994): The very fast multipole method, *J. Chem. Phys.* **101**, 8870–8876.
- [283] PETRUSHEV, P. P. UND POPOV, V. A. (1987): *Rational approximation of real functions*. Cambridge U. P., Cambridge.
- [284] PISANI, C., DOVESI, R. UND ROETTI, C. (1988): *Hartree-Fock ab initio treatment of crystalline systems*. Springer-Verlag, Berlin.

- [285] PROSSER, F. P. UND BLANCHARD, C. H. (1962): On the evaluation of two-center integrals, *J. Chem. Phys.* **36**, 1112.
- [286] PRUDNIKOV, A. P., BRYCHKOV, Y. A. UND MARICHEV, O. I. (1986): *Integrals and Series*, Band 2. Gordon and Breach, New York.
- [287] PULAY, P. (1980): Convergence acceleration of iterative sequences. The case of SCF iterations, *Chem. Phys. Lett.* **73**, 393–398.
- [288] RAHMANI-GASMI, N. (1985): Stabilité Numérique de l'Algorithme de GRG. Accélération de la Convergence et Optimisation du Temps de Calcul. Thèse 3ème cycle, Université de Paris VI.
- [289] RAINVILLE, E. D. (1971): *Special Functions*. Chelsea, New York.
- [290] RASHID, M. A. (1986): Simple expressions for radial functions appearing in the expansions of $\mathcal{Y}_{\ell_1}^{m_1}(\nabla)F_{\ell_2}^{m_2}(r)$ and $\nabla^{2n}\mathcal{Y}_{\ell_1}^{m_1}(\nabla)F_{\ell_2}^{m_2}(r)$, *J. Math. Phys.* **27**, 549–551.
- [291] RE, G. D., LADIK, J. UND BISCZÓ, G. (1967): Self-consistent field tight-binding treatment of polymers. I Infinite three-dimensional case, *Phys. Rev.* **155**, 997 – 1003.
- [292] REED, M. UND SIMON, B. (1978): *Methods of modern mathematical physics IV: Analysis of operators*. Academic Press, New York.
- [293] REYNOLDS, C. A., ESSEX, J. W. UND RICHARDS, W. G. (1992): Atomic charges for variable molecular conformations, *J. Amer. Chem. Soc.* **114**, 9075–9079.
- [294] RICHARDSON, L. F. (1927): The deferred approach to the limit. I. Single lattice, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A* **226**, 229–349.
- [295] RINEHART, R. F. (1955): The equivalence of definitions of a matrix function, *Amer. Math. Monthly* **62**, 395–414.
- [296] ROKHLIN, V. (1985): Rapid solution of integral equations of classical potential theory, *J. Comput. Phys.* **60**, 187–207.
- [297] ROOS, B. (Hrsg.) (1992): *Lecture notes in quantum chemistry*, Band 58, Reihe *Lecture Notes in Chemistry*. Springer-Verlag, Berlin.
- [298] ROOS, B. (Hrsg.) (1994): *Lecture notes in quantum chemistry II*, Band 64, Reihe *Lecture Notes in Chemistry*. Springer-Verlag, Berlin.
- [299] ROSS, B. (1987): *Methods of summation*. Descartes Press, Koriyama.
- [300] ROWE, E. G. P. (1978): Spherical delta functions and multipole expansions, *J. Math. Phys.* **19**, 1962–1968.

- [301] RUEDENBERG, K. (1967): Bipolare Entwicklungen, Fouriertransformation und Molekulare Mehrzentren-Integrale, *Theor. Chim. Acta* **7**, 359–366.
- [302] RUELLE, D. (1969): *Statistical Mechanics*. Mathematical Physics Monograph Series. W. A. Benjamin, Inc., New York, Amsterdam.
- [303] RYCHLEWSKI, J. (1994): On the use of explicitly correlated functions in variational computations for small molecules, *Int. J. Quantum Chem.* **49**, 477–494.
- [304] SADOK, H. (1990): About Henrici's transformation for accelerating vector sequences, *J. Comput. Appl. Math.* **29**, 101–110.
- [305] SADOK, H. (1993): Quasilinear vector extrapolation methods, *Linear Alg. Appl.* **190**, 71–85.
- [306] SAFF, E. B. UND VARGA, R. S. (Hrsg.) (1977): *Padé and rational approximation*. Academic Press, New York.
- [307] SCHMIDT, C., WARKEN, M. UND HANDY, N. C. (1993): The Feenberg series. An alternative to the Møller-Plesset series, *Chem. Phys. Lett.* **211**, 272–281.
- [308] SCHULMAN, J. M. UND MUSER, J. I. (1968): Hydrogen-atom polarizability as a Hartree-Fock perturbation expansion: A geometric approximation to atomic polarizabilities, *J. Chem. Phys.* **49**, 4845–4848.
- [309] SCHUSTER, H. G. (1988): *Deterministic Chaos. An Introduction*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, zweite Auflage.
- [310] SCHWABL, F. (1988): *Quantenmechanik*. Springer-Verlag, Berlin.
- [311] SEEGER, R. (1982): Integrals of Gaussian and continuum functions for polyatomic molecules. An addition theorem for solid harmonic Gaussians, *Chem. Phys. Lett.* **92**, 493–497.
- [312] SELLERS, H. (1991): ADEM-DIOS: An SCF convergence algorithm for difficult cases, *Chem. Phys. Lett.* **180**, 461–465.
- [313] SELLERS, H. (1993): The C^2 -DIIS convergence acceleration algorithm, *Int. J. Quantum Chem.* **45**, 31–41.
- [314] SHANKS, D. (1955): Non-linear transformations of divergent and slowly convergent sequences, *J. Math. and Phys. (Cambridge, Mass.)* **34**, 1–42.
- [315] SHAVITT, I. (1977): The method of configuration interaction. In SCHAEFER III, H. F. (Hrsg.), *Methods of electronic structure theory*, S. 189–275. Plenum Press, New York.

- [316] SHAW, J. K., JOHNSON, L. W. UND RIESS, R. D. (1976): Accelerating convergence of eigenfunction expansions, *Math. Comp.* **30**, 469–477.
- [317] SIDI, A. (1979): Some properties of a generalization of the Richardson extrapolation process, *J. Inst. Math. Appl.* **24**, 327–346.
- [318] SIDI, A. (1982): An algorithm for a special case of a generalization of the Richardson extrapolation process, *Numer. Math.* **38**, 299–307.
- [319] SIDI, A. (1988): Extrapolation vs. projection methods for linear systems of equations, *J. Comput. Appl. Math.* **22**, 71–88.
- [320] SIDI, A. (1990): Application of vector extrapolation methods to consistent singular linear systems, *Appl. Numer. Math.* **6**, 487–500.
- [321] SIDI, A. (1991): Efficient implementation of minimal polynomial and reduced rank extrapolation methods, *J. Comput. Appl. Math.* **36**, 305–337.
- [322] SIDI, A. (1994): Rational approximations from power series of vector-valued meromorphic functions, *J. Approx. Theory* **77**, 89–111.
- [323] SIDI, A. (1995): Acceleration of convergence of (generalized) Fourier series by the d -transformation, *Ann. Numer. Math.* **2**, 381–406.
- [324] SIDI, A. (1995): Convergence analysis for a generalized Richardson extrapolation process with an application to the $d^{(1)}$ transformation on convergent and divergent sequences, *Math. Comput.* **64**, 1627–1657.
- [325] SIDI, A. UND BRIDGER, J. (1988): Convergence and stability analyses for some vector extrapolation methods in the presence of defective iteration matrices, *J. Comput. Appl. Math.* **22**, 35–61.
- [326] SIDI, A., FORD, W. F. UND SMITH, D. A. (1986): Acceleration of convergence of vector sequences, *SIAM J. Numer. Anal.* **23**, 178–196.
- [327] SLATER, J. C. (1930): Atomic shielding constants, *Phys. Rev.* **36**, 57–64.
- [328] SMITH, D. A. UND FORD, W. F. (1979): Acceleration of linear and logarithmic convergence, *SIAM J. Numer. Anal.* **16**, 223–240.
- [329] SMITH, D. A. UND FORD, W. F. (1982): Numerical comparisons of nonlinear convergence accelerators, *Math. Comput.* **38**, 481–499.
- [330] SMITH, D. A., FORD, W. F. UND SIDI, A. (1987): Extrapolation methods for vector sequences, *SIAM Rev.* **29**, 199–233.
- [331] SMITH, D. A., FORD, W. F. UND SIDI, A. (1988): Correction to “Extrapolation methods for vector sequences”, *SIAM Rev.* **30**, 623–624.

- [332] SOKALSKI, W. A. UND SAWARYN, A. (1987): Correlated molecular and cumulative atomic multipole moments, *J. Chem. Phys.* **87**, 526–534.
- [333] STEINBORN, E. O. (1983): On the evaluation of exponential (Slater) type integrals. In DIERCKSEN, G. H. F. UND WILSON, S. (Hrsg.), *Methods in computational molecular physics*, S. 37–69. Reidel, Dordrecht.
- [334] STEINBORN, E. O. UND FILTER, E. (1975): Translations of fields represented by spherical-harmonic expansions for molecular calculations. III Translations of reduced Bessel functions, Slater-type *s*-orbitals and other functions, *Theor. Chim. Acta* **38**, 273–281.
- [335] STEINBORN, E. O. UND FILTER, E. (1979): Symmetrie und analytische Struktur der Additionstheoreme räumlicher Funktionen und der Mehrzentren-Molekülintegrale über beliebige Atomfunktionen, *Theor. Chim. Acta* **52**, 189–208.
- [336] STEINBORN, E. O. UND HOMEIER, H. H. H. (1990): Möbius-type quadrature of electron repulsion integrals with *B* functions, *Int. J. Quantum Chem. Symp.* **24**, 349–363.
- [337] STEINBORN, E. O., HOMEIER, H. H. H. UND WENIGER, E. J. (1992): Recent progress on representations for Coulomb integrals of exponential-type orbitals, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **260**, 207–221.
- [338] STEINBORN, E. O. UND SILVER, D. M. (in Vorbereitung): Analysis of diagrammatic quasi-degenerate many-body perturbation theory.
- [339] STEINBORN, E. O. UND WENIGER, E. J. (1990): Sequence transformations for the efficient evaluation of infinite series representations of some molecular integrals with exponentially decaying basis functions, *J. Mol. Struct. (Theochem)* **210**, 71–78.
- [340] STEINBORN, E. O. UND WENIGER, E. J. (1992): Nuclear attraction and electron interaction integrals of exponentially decaying functions and the Poisson equation, *Theor. Chim. Acta* **83**, 105–121.
- [341] STICKEL, E. U. (1985): Fast computation of matrix exponential and logarithm, *Analysis* **5**, 163–173.
- [342] STOER, J. (1983): *Einführung in die Numerische Mathematik*, Band I. Springer, Berlin.
- [343] STONE, A. J. UND ALDERTON, M. (1985): Distributed multipole analysis. Methods and applications, *Mol. Phys.* **56**, 1047–1064.
- [344] STORER, J. W., GIESEN, D. J., CRAMER, C. J. UND TRUHLAR, D. G. (1995): Class IV charge models: A new semiempirical approach in quantum chemistry, *J. Comput.-Aid. Mol. Des.* **9**, 87–110.
<http://wucmd.wustl.edu/jcamd/278/paper.html>.

- [345] SZABO, A. UND OSTLUND, N. S. (1989): *Modern quantum chemistry*. McGraw-Hill, New York.
- [346] TAKAHASHI, M., BRACKEN, P., ČÍŽEK, J. UND PALDUS, J. (1995): Perturbation expansion of the ground state energy for the one-dimensional cyclic Hubbard system in the Hückel limit, *Int. J. Quantum Chem.* **53**, 457–466.
- [347] TAKAHASHI, M. UND PALDUS, J. (1985): Bond length alternation in cyclic polyenes. VI Coupled cluster approach with Wannier orbital basis, *Int. J. Quantum Chem.* **28**, 459–479.
- [348] TAKAHASHI, M. UND PALDUS, J. (1985): Coupled-cluster approach to electron correlation in one dimension. II Cyclic polyene model in localized basis, *Phys. Rev. B* **31**, 5121–5142.
- [349] TAL-EZER, H. (1989): Polynomial approximation of functions of matrices and applications, *J. Sci. Comput.* **4**, 25–60.
- [350] TALMAN, J. D. (1984): Numerical calculation of four-center Coulomb integrals, *J. Chem. Phys.* **80**, 2000–2008.
- [351] TALMAN, J. D. (1986): Numerical calculation of nuclear attraction three-center integrals for arbitrary orbitals, *J. Chem. Phys.* **84**, 6879–6885.
- [352] TALMAN, J. D. (1989): Numerical methods for calculating multicenter integrals for arbitrary orbitals. In DEFRANCESCHI, M. UND DELHALLE, J. (Hrsg.), *Numerical determination of the electronic structure of atoms, diatomic and polyatomic molecules*, S. 335–339. Kluwer, Dordrecht.
- [353] TALMAN, J. D. (1993): Expressions for overlap integrals of Slater orbitals, *Phys. Rev. A* **48**, 243–249.
- [354] TASCHE, M. (1979): Zur Konvergenzbeschleunigung von Fourier-Reihen, *Math. Nachr.* **90**, 123–134.
- [355] THIELE, E. (1963): Equation of state for hard spheres, *J. Chem. Phys.* **39**, 474–479.
- [356] TODD, J. (1975): The lemniscate constants, *Commun. ACM* **18**, 14–19.
- [357] TRIVEDI, H. P. UND STEINBORN, E. O. (1983): Fourier transform of a two-center product of exponential-type orbitals. Application to one- and two-electron multicenter integrals, *Phys. Rev. A* **27**, 670–679.
- [358] TRUESDELL, C. (1948): *An essay toward a unified theory of special functions based upon the functional equation $\frac{\partial}{\partial z}F(z, \alpha) = F(z, \alpha + 1)$* . Princeton U. P., Princeton.
- [359] TRUESDELL, C. (1950): On the addition and multiplication theorems of special functions, *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* **36**, 752–755.

- [360] WAHL, A. UND DAS, G. (1977): The multiconfiguration self-consistent field method. In SCHAEFER III, H. (Hrsg.), *Modern Theoretical Chemistry*, Band 3, S. 51–78. Plenum Press, New York, London.
- [361] WALL, H. S. (1973): *Analytic theory of continued fractions*. Chelsea, New York.
- [362] WALZ, G. (1988): Computing the matrix exponential and other matrix functions, *J. Comput. Appl. Math.* **21**, 119–123.
- [363] WALZ, G. (1991): Asymptotic expansions and acceleration of convergence for higher order iteration processes, *Numer. Math.* **59**, 529–540.
- [364] WANG, H. Y. UND LESAR, R. (1996): An efficient fast multipole algorithm based on an expansion in the solid harmonics, *J. Chem. Phys.* **104**, 4173–4179.
- [365] WEATHERFORD, C. A. UND JONES, H. W. (Hrsg.) (1982): *ETO multicenter molecular integrals*. Reidel, Dordrecht.
- [366] WEISSBLUTH, M. (1978): *Atoms and molecules*. Academic Press.
- [367] WENIGER, E. J. (1985): Weakly convergent expansions of a plane wave and their use in Fourier integrals, *J. Math. Phys.* **26**, 276–291.
- [368] WENIGER, E. J. (1989): Nonlinear sequence transformations for the acceleration of convergence and the summation of divergent series, *Comput. Phys. Rep.* **10**, 189–371.
- [369] WENIGER, E. J. (1990): On the summation of some divergent hypergeometric series and related perturbation expansions, *J. Comput. Appl. Math.* **32**, 291–300.
- [370] WENIGER, E. J. (1991): On the derivation of iterated sequence transformations for the acceleration of convergence and the summation of divergent series, *Comput. Phys. Commun.* **64**, 19–45.
- [371] WENIGER, E. J. (1992): Interpolation between sequence transformations, *Numer. Algor.* **3**, 477–486.
- [372] WENIGER, E. J. (1994): *Verallgemeinerte Summationsprozesse als numerische Hilfsmittel für quantenmechanische und quantenchemische Rechnungen*. Habilitationsschrift, Universität Regensburg.
- [373] WENIGER, E. J. (1996): A convergent renormalized strong coupling expansion perturbation expansion for the ground state energy of the quartic, sextic, and octic anharmonic oscillator, *Ann. Phys.* **246**, 133–165.
- [374] WENIGER, E. J. (1996): Erratum: Nonlinear sequence transformations: A computational tool for quantum mechanical and quantum chemical calculations, *Int. J. Quantum Chem.* **58**, 319–321.

- [375] WENIGER, E. J. (1996): Nonlinear sequence transformations: A computational tool for quantum mechanical and quantum chemical calculations, *Int. J. Quantum Chem.* **57**, 265–280.
- [376] WENIGER, E. J. UND ČÍŽEK, J. (1990): Rational approximations for the modified Bessel function of the second kind, *Comput. Phys. Commun.* **59**, 471–493.
- [377] WENIGER, E. J., ČÍŽEK, J. UND VINETTE, F. (1991): Very accurate summation for the infinite coupling limit of the perturbation series expansions of anharmonic oscillators, *Phys. Lett. A* **156**, 169–174.
- [378] WENIGER, E. J., ČÍŽEK, J. UND VINETTE, F. (1993): The summation of the ordinary and renormalized perturbation series for the ground state energy of the quartic, sextic and octic anharmonic oscillators using nonlinear sequence transformations, *J. Math. Phys.* **34**, 571–609.
- [379] WENIGER, E. J., GROTENDORST, J. UND STEINBORN, E. O. (1986): Unified analytical treatment of overlap, two-center nuclear attraction, and Coulomb integrals of B functions via the Fourier transform method, *Phys. Rev. A* **33**, 3688–3705.
- [380] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1982): Programs for the coupling of spherical harmonics, *Comput. Phys. Commun.* **25**, 149–157.
- [381] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1983): New representations for the spherical tensor gradient and the spherical delta function, *J. Math. Phys.* **24**, 2553–2563.
- [382] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1983): Numerical properties of the convolution theorems of B functions, *Phys. Rev. A* **28**, 2026–2041.
- [383] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1983): The Fourier transforms of some exponential-type functions and their relevance to multicenter problems, *J. Chem. Phys.* **78**, 6121–6132.
- [384] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1985): A simple derivation of the addition theorems of the irregular solid harmonics, the Helmholtz harmonics and the modified Helmholtz harmonics, *J. Math. Phys.* **26**, 664–670.
- [385] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1988): Overlap integrals of B functions. A numerical study of infinite series representations and integral representations, *Theor. Chim. Acta* **73**, 323–336.
- [386] WENIGER, E. J. UND STEINBORN, E. O. (1989): Addition theorems for B functions and other exponentially declining functions, *J. Math. Phys.* **30**, 774–784.
- [387] WERNER, H. UND BÜNGER, H. J. (Hrsg.) (1984): *Padé approximations and its applications, Bad Honnef 1983*. Springer-Verlag, Berlin.

- [388] WERNER, H.-J. (1987): Matrix-formulated direct multi-configuration self-consistent field and multi-configuration reference configuration-interaction methods. In LAWLEY, K. P. (Hrsg.), *Ab initio methods in quantum chemistry*, Band II, S. 1–62. Wiley, Chichester.
- [389] WERTHEIM, M. S. (1963): Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres, *Phys. Rev. Lett.* **10**, 321–323.
- [390] WHITE, C. A. UND HEAD-GORDON, M. (1994): Derivation and efficient implementation of the fast multipole method, *J. Chem. Phys.* **101**, 6593–6605.
- [391] WILLIAMS, D. E. (1991): Net Atomic Charge and Multipole Models for the Ab Initio Molecular Electric Potential. In Boyd und Lipkowitz [40], S. 219–271.
- [392] WILSON, S. (1984): *Electron correlation in molecules*. Clarendon Press, Oxford.
- [393] WILSON, S., SILVER, D. M. UND FARRELL, R. A. (1977): Special invariance properties of the $[N+1/N]$ Padé approximants in Rayleigh–Schrödinger perturbation theory, *Proc. R. Soc. Lond. A* **356**, 363–374.
- [394] WIMP, J. (1981): *Sequence transformations and their applications*. Academic Press, New York.
- [395] WINDEMUTH, A. (1995): Advanced algorithms for molecular dynamics simulation: The program PMD. In MATTSON, T. G. (Hrsg.), *Parallel Computing in Computational Chemistry*. ACS Books.
- [396] WINDEMUTH, A. UND SCHULTEN, K. (1991): Molecular dynamics on the Connection Machine, *Molec. Simul.* **5**, 353–361.
- [397] WOON, D. (1993): Accurate modeling of intermolecular forces: a systematic Møller-Plesset study of the argon dimer using correlation consistent basis sets, *Chem. Phys. Lett.* **204**, 29–35.
- [398] WUYTACK, L. (Hrsg.) (1979): *Padé approximations and its applications*. Springer-Verlag, Berlin.
- [399] WYNN, P. (1956): On a device for computing the $e_m(S_n)$ transformation, *Math. Tables Aids Comput.* **10**, 91–96.
- [400] WYNN, P. (1956): On a procrustean technique for the numerical transformation of slowly convergent sequences and series, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **52**, 663–671.
- [401] WYNN, P. (1962): Acceleration techniques for iterated vector and matrix problems, *Math. Comput.* **16**, 301–322.

- [402] YE, Y.-J., FÖRNER, W. UND LADIK, J. (1993): Numerical application of the coupled cluster theory with localized orbitals to polymers. I Total correlation energy per unit cell, *Chem. Phys.* **178**, 1–23.
- [403] ZHOU, R. UND BERNE, B. J. (1995): A new molecular dynamics method combining the reference system propagator algorithm with a fast multipole method for simulating proteins and other complex systems, *J. Chem. Phys.* **103**, 9444–9459.

Danksagungen

Herrn Professor E.O. Steinborn danke ich sehr herzlich für die stets gewährte Unterstützung durch anregende Diskussionen, insbesondere für wertvolle Hinweise bezüglich der Präsentation meiner Arbeitsergebnisse, sowie für die ausgezeichneten Arbeitsbedingungen und die vielfältigen Möglichkeiten zur Zusammenarbeit mit hiesigen und mit ausländischen Arbeitsgruppen, die sich mir in seiner Arbeitsgruppe am Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Regensburg geboten haben.

Herrn Privatdozent E.J. Weniger danke ich für die umfangreiche und sehr fruchtbare Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Beschleunigungsverfahren und für die vielfältigen einführenden Hinweise zur Literatur. Herrn Dr. H. Meißner danke ich für seine Unterstützung und die Eröffnung neuer Fragestellungen hinsichtlich der Extrapolation von Iterationsverfahren, die sicher das Thema weiterer gemeinsamer Arbeiten sein werden. Herrn Dipl.-Phys. J. Dotterweich danke ich für Diskussionen hinsichtlich Optimierungsverfahren.

Herrn Professor B. Dick und Herrn Professor H. Yersin danke ich für vielfältige Diskussionen zu Fragen der Matrixisolationsspektroskopie, die ich durch sie näher kennenlernte, sowie ihre Unterstützung bei der Einarbeitung in dieses wichtige experimentelle Gebiet. Insbesondere möchte ich mich bei Herrn Professor Dick und bei Herrn Dipl.-Chem. J. Decker aus der Arbeitsgruppe von Herrn Professor Dick bedanken für die Zusammenarbeit und Mitteilung von Ergebnissen auf dem Gebiet des spektralen Lochbrennens.

Herrn Professor J. Barthel und Herrn Professor H. Krienke danke ich für ihre Unterstützung und wissenschaftliche Anregungen auf dem Gebiet der Theorie der Flüssigkeiten. Vor allem bedanke ich mich für die enge Zusammenarbeit hinsichtlich der Ornstein-Zernike-Gleichung bei Herrn Professor Krienke und bei Herrn Dipl.-Chem. S. Rast aus der Arbeitsgruppe von Herrn Professor Krienke.

Herrn Professor P. Otto und Herrn Privatdozent W. Förner vom Institut für Physikalische und Theoretische Chemie der Universität Erlangen-Nürnberg danke ich für wegweisende Diskussionen hinsichtlich der inversen Dyson-Gleichung.

Bei Herrn Professor C. Daul (Fribourg, Schweiz) und Herrn Dr. M. Znojil (Řež, Tschechische Republik) möchte ich mich für die verschiedenen Einladungen zu längeren Aufenthalten in ihren Arbeitsgruppen bedanken, bei denen ich meine Resultate präsentieren konnte und wertvolle Hinweise für zukünftige Arbeitsfelder erhielt.

Schließlich möchte ich mich bei meiner Frau Silke und meinen Kindern Anne und Gesa für ihre Geduld und moralische Unterstützung bedanken, deren Fröhlichkeit und Liebe

mir sehr geholfen haben und ohne die diese Arbeit so nicht hätte entstehen können.