

Numerische Mathematik

Vorlesungen, Übungen, Algorithmen und Programme

Privatdozent Dr. rer. nat. habil. Werner Neundorf

Institut für Mathematik

**der Fakultät für Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Ilmenau**

Ilmenau 2002

Inhaltsverzeichnis

1	Numerisches Rechnen	1
1.1	Computerzahlen	1
1.2	Gleitpunktarithmetik	6
1.2.1	Rundung	6
1.2.2	Maschinengenauigkeit	7
1.2.3	Gleitpunktoperationen	8
1.3	Numerisches Verfahren	10
1.3.1	Fehleranalyse und Konditionszahl	11
1.3.2	Fehler numerischer Verfahren	14
1.3.3	Fehler mehrstufiger Verfahren	18
2	Vektoren, Matrizen, Norm und Kondition	19
2.1	Vektoren und Matrizen	19
2.2	Norm	25
2.2.1	Vektornorm	25
2.2.2	Matrixnorm	27
2.3	Kondition	30
2.3.1	Bedeutung der Kondition	30
2.3.2	Kondition und Konditionszahl einer Matrix	31
2.3.3	Anwendung der Konditionszahl auf lineare Gleichungssysteme	32
2.3.4	Weitere Eigenschaften der Konditionszahl	32
2.3.5	Fehlerschätzungen mit Rückwärtsanalyse	33
2.3.6	Schätzungen der Konditionszahl	36
3	Lineare Gleichungssysteme	38
3.1	Einführung	38
3.2	Austauschalgorithmus	41

3.3	Direkte Verfahren	49
3.3.1	Eliminationsverfahren und Matrixzerlegung	49
3.3.2	Komplexität	50
3.3.3	Gauß-Reduktion ohne Pivotisierung	51
3.3.4	Verketteter Gauß-Algorithmus	55
3.3.5	LU -Faktorisierung ohne Pivotisierung	57
3.3.6	Cholesky-Verfahren	58
3.4	Pivotstrategien und Skalierung	61
3.4.1	Spaltenpivotisierung mit Zeilenvertauschung	61
3.4.2	Explizite Zeilenskalierung	62
3.4.3	Implizite Zeilenskalierung	63
3.4.4	Pivotstrategien	68
3.4.5	Skalierung	69
3.4.6	Skalierungsvarianten	70
3.5	Matrixfaktorisierung mit Beispielen	74
3.6	Iterative Verfahren	79
3.6.1	Allgemeine Iterationsform	79
3.6.2	Basisverfahren	80
3.6.3	Weitere Iterationsverfahren	99
3.7	Abstiegsverfahren	106
3.7.1	Gradientenverfahren	106
3.7.2	Verfahren der konjugierten Gradienten	109
3.8	Modellproblem mit Vergleich von Iterationsverfahren	112
3.9	Testmatrizen und LGS	117
4	Eigenwertproblem und Singulärwertzerlegung	121
4.1	Definitionen und Grundlagen	121
4.1.1	Eigenschaften der Eigenwerte	122
4.1.2	Eigenschaften von Matrizen in Bezug auf Eigenwerte	125
4.1.3	Eigenschaften von Eigenvektoren	128
4.1.4	Eigenwertprobleme in der Praxis	129
4.2	Verfahren zur Lösung des Eigenwertproblems	129
4.2.1	Klassifizierung der numerischen Verfahren	129
4.2.2	Übersicht zu Verfahren	130
4.3	Vektoriteration	134
4.3.1	Basisalgorithmus der Vektoriteration	134

4.3.2	Konvergenzverbesserung	137
4.3.3	Sonderfälle	141
4.3.4	Berechnung der nächsten Eigenwerte	147
4.3.5	Weitere Beispiele	155
4.4	Inverse Vektoriteration	157
4.5	Simultane Vektoriteration	157
4.5.1	Ausgangsproblem	158
4.5.2	Diagonalisierung bei mehrfachen Eigenwerten	158
4.5.3	Orthonormierung nach Cholesky	160
4.5.4	Lösung des EWP $A\bar{x} = \lambda\bar{x}$	161
4.5.5	Partielle Lösung des EWP $A\bar{X} = \bar{X}\Lambda$	162
4.5.6	Verbesserungen der simultanen Vektoriteration	163
4.6	Ähnlichkeitstransformation, Orthogonal- und Elementarmatrizen	174
4.6.1	Spezielle Orthogonalmatrizen	178
4.6.2	Elementarmatrizen	182
4.7	QR -Faktorisierung	185
4.7.1	QR -Faktorisierung und Gram-Schmidt-Verfahren	185
4.7.2	QR -Faktorisierung mit Givens-Rotationen	188
4.7.3	QR -Faktorisierung mit Householder-Reflexionen	191
4.8	Jacobi-Verfahren	193
4.8.1	Klassisches Jacobi-Verfahren	193
4.8.2	Zyklisches Jacobi-Verfahren	200
4.8.3	Nachbesserung des Jacobi-Verfahrens	205
4.8.4	Hypermatrix-Version des Jacobi-Verfahrens	209
4.8.5	Verallgemeinertes Jacobi-Verfahren	211
4.9	Eigenwertproblem mit Orthogonalisierungsverfahren	218
4.9.1	QR -Verfahren	218
4.9.2	QR -Verfahren als Zweistufen-Verfahren	227
4.9.3	Givens-Verfahren	232
4.9.4	Householder-Verfahren	235
4.9.5	Methode von Lanczos	239
4.9.6	Hessenberg-Verfahren	245
4.10	Eigenwertproblem für Tridiagonalmatrizen	259
4.10.1	Varianten zur Berechnung eines Eigenwerts	260
4.11	Singulärwertzerlegung	265

4.11.1	Algorithmus der Singulärwertzerlegung	267
4.11.2	Beispiele	269
4.11.3	Singulärwertzerlegung und Kleinste-Quadrate-Methode	274
4.12	Allgemeine Eigenwertprobleme	279
4.13	Testmatrizen zum Eigenwertproblem	281
5	Nichtlineare Gleichungen und Gleichungssysteme	289
5.1	Allgemeines Iterationsverfahren	289
5.2	Spezielle Iterationsverfahren	297
5.3	Einschachtelungsverfahren	300
5.4	Verfahren höherer Ordnung	302
5.4.1	Verfahren mittels Taylor-Reihe der Funktion	302
5.4.2	Verfahren mittels Taylor-Reihe der inversen Funktion	305
5.4.3	Fehlerabschätzung	306
5.5	Nichtlineare Gleichungssysteme	309
5.5.1	Allgemeines Iterationsverfahren	309
5.5.2	Newton-Verfahren für Systeme	310
5.5.3	Konvergenz des Newton-Verfahrens	312
6	Polynome, Interpolation, Splines und Differentiation	315
6.1	Polynome	315
6.1.1	Einfaches Horner-Schema	315
6.1.2	Vollständiges Horner-Schema	316
6.1.3	Inverses Horner-Schema	317
6.2	Allgemeines Interpolationsproblem	319
6.3	Polynominterpolation im $\mathbb{R}^1$	319
6.3.1	Lagrange-Interpolation	322
6.3.2	Kondition der Interpolation	325
6.3.3	Newton-Interpolation	333
6.3.4	Polynomwertberechnung	343
6.4	Hermite-Interpolation	345
6.4.1	Bestimmung des Hermite-Interpolationspolynoms	346
6.4.2	Allgemeine Referenz	349
6.4.3	Kubische Hermite-Basis	350
6.5	Fehler und Konvergenz	352
6.5.1	Fehlerfortpflanzung in Schemata	352

6.5.2	Konvergenz der Interpolation	352
6.5.3	Konvergenzsätze	354
6.5.4	Bemerkungen zur Wahl der Tschebyscheff-Referenz	356
6.6	Trigonometrische Interpolation	358
6.6.1	Übersicht und Merkmale	358
6.6.2	Komplexe und reelle trigonometrische Interpolation	361
6.6.3	Diskrete Fourier-Transformation	366
6.7	Splineinterpolation im $\mathbb{R}^1$	375
6.7.1	Einfache Typen von Splines	376
6.7.2	Kubische Splines	381
6.7.3	B-Splines	385
6.7.4	Krümmung einer Kurve	400
6.7.5	Parametrische Splines zur Kurvendarstellung	403
6.8	Differentiation	404
7	Orthogonale Funktionensysteme und Termrekursion	406
7.1	Orthogonale Polynome	406
7.1.1	Legendre-Polynome	407
7.1.2	Tschebyscheff-Polynome 1. Art	410
7.1.3	Hermite-Polynome	419
7.1.4	Laguerre-Polynome	422
7.1.5	Gauß-Jacobi-Polynome	425
7.1.6	Bessel-Funktionen	425
7.2	Termrekursion	428
7.2.1	Zwei-Term-Rekursion	429
7.2.2	Drei-Term-Rekursion	430
7.3	Orthogonalität und Drei-Term-Rekursion	433
7.3.1	Theoretische Grundlagen	434
7.3.2	Homogene und inhomogene Rekursion	437
7.3.3	Numerische Aspekte	439
7.3.4	Allgemeine adjungierte Summation	442
8	Approximation, Ausgleichsrechnung und Fourier-Analyse	444
8.1	Approximationsarten im Überblick	444
8.1.1	Interpolation	444
8.1.2	Entwicklung in Funktionenreihen	445

8.1.3	Approximation in linearen normierten Räumen	447
8.2	Diskrete Approximation im Mittel	453
8.2.1	Die Methode der kleinsten Quadrate	453
8.2.2	Ausgleich durch Polynome im $\mathbb{R}^1$	460
8.2.3	Nichtlinearer Ausgleich	465
8.2.4	Ausgleich durch lineare Funktionen im $\mathbb{R}^n$	468
8.3	Stetige Approximation im Mittel	470
8.3.1	Norm und Quasinorm	470
8.3.2	Lineares Approximationsproblem	470
8.3.3	Approximation im Mittel mit Orthogonalsystemen	477
8.3.4	Approximation im Mittel mit trigonometrischen Polynomen	485
8.3.5	Das Faltungsschema von Runge	491
8.3.6	Die schnelle Fourier-Transformation	502
8.4	Gleichmäßige stetige Approximation	509
8.4.1	Das Verfahren von Remez	514
8.5	Gleichmäßige diskrete Approximation	518
8.6	Zur Approximation von Ableitungen	524
9	Numerische Integration	527
9.1	Numerische Integration im $\mathbb{R}^1$	527
9.1.1	Grundlagen	527
9.1.2	Berechnung von Integrationsknoten und -gewichten	531
9.1.3	Genauigkeit der Integration und Fehlerabschätzungen	533
9.2	Newton-Cotes-Formeln	538
9.2.1	Abgeschlossene Newton-Cotes-Formeln	538
9.2.2	Halbabgeschlossene Newton-Cotes-Formeln	552
9.2.2	Offene Newton-Cotes-Formeln	554
9.3	Tschebyscheff-Formeln	560
9.3.1	Einfachste Tschebyscheff-Formeln	560
9.3.2	Übersichten	563
9.3.3	Zur Bestimmung des Polynoms und Fehlers	566
9.4	Gauß-Legendre-Formeln	568
9.4.1	Übersicht zu den Gauß-Legendre-Formeln	572
9.4.2	Zur expliziten Berechnung der Gewichte	573
9.4.3	Einfache Gauß-Legendre-Formeln	577
9.4.4	Beispiele	578

9.5	Hermite-Integration	583
9.5.1	Interpolationsquadratur von Hermite	583
9.6	Die Formeln von Gauß-Christoffel	589
9.6.1	Gauß-Legendre-Quadratur	593
9.6.2	Gauß-Tschebyscheff-Quadratur (1. Art)	594
9.6.3	Gauß-Hermite-Quadratur	597
9.6.4	Gauß-Laguerre-Quadratur	599
9.6.5	Zur praktischen Berechnung von Knoten und Gewichten	601
9.7	Zusammengesetzte Quadraturformeln	603
9.7.1	Grundlagen	603
9.7.2	Zusammengesetzte Newton-Cotes-Formeln	607
9.7.3	Fehlerschätzung nach dem Runge-Prinzip	610
9.7.4	Zusammenhang zwischen Quadraturformeln	613
9.7.5	Zusammengesetzte Gauß-Legendre-Formeln	622
9.7.6	Vergleich der Formeltypen	626
9.8	Extrapolation und Romberg-Verfahren	630
9.8.1	Quadraturfehler und Extrapolation der Trapezregel	630
9.8.2	Das Romberg-Verfahren	632
9.8.3	Allgemeine Extrapolationsmethoden	641
9.8.4	Adaptive Quadraturen	645
9.9	Aufgaben und Beispiele	660
9.9.1	Übersicht zu Quadraturformeln	660
9.9.2	Anwendungen	661
9.9.3	Testbeispiele für Quadraturformeln	666
A	Übungsaufgaben	668
A.1	Ser.1 - Numerisches Rechnen	668
A.2	Ser.2 - Vektoren, Matrizen, Norm und Kondition	670
A.3	Ser.3 - Lineare Gleichungssysteme	673
A.4	Ser.4 - Eigenwertproblem und Singulärwertzerlegung	688
A.5	Ser.5 - Nichtlineare Gleichungen und Gleichungssysteme	697
A.6	Ser.6 - Polynome, Interpolation, Splines und Differentiation	710
A.7	Ser.7 - Orthogonale Funktionensysteme und Termrekursion	732
A.8	Ser.8 - Approximation, Ausgleichsrechnung und Fourier-Reihen	735
A.9	Ser.9 - Numerische Integration	745

B Programme in Turbo Pascal	761
C Arbeitsblätter in Matlab und Maple	763
C.1 Matlab	763
C.2 Maple	764
D Programmsysteme zur Numerik	767
D.1 NUMI2	767
D.2 MAYA	768
Literaturverzeichnis	769
Symbolverzeichnis	775
Akronyme und Abkürzungen	780
Index	782