



Formelsammlung zur Numerischen Mathematik mit C-Programmen

von

PROF. DR. GISELA ENGELN-MÜLLGES

Fachhochschule Aachen

und

O. PROF. EM. DR. FRITZ REUTTER

**Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule
Aachen**

ANHANG C-PROGRAMME

von

Dr. Albert Becker, Thilo Gukelberger

und Dorothee Seesing-Völkel

**2., vollständig überarbeitete und
erweiterte Auflage**



Wissenschaftsverlag
Mannheim/Wien/Zürich

INHALTSVERZEICHNIS

	Seite
1 Darstellung von Zahlen und Fehleranalyse	1
1.1 Definition von Fehlergrößen	1
1.2 Dezimaldarstellung von Zahlen	2
1.3 Fehlerquellen	6
1.3.1 Der Verfahrensfehler	6
1.3.2 Der Eingangsfehler	6
1.3.3 Der Rechnungsfehler	9
2 Numerische Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungen	11
2.1 Aufgabenstellung und Anwendungsempfehlungen	11
2.2 Definitionen und Sätze über Nullstellen	12
2.3 Allgemeines Iterationsverfahren	12
2.3.1 Konstruktionsmethode und Definition	12
2.3.2 Existenz von Lösungen und deren Eindeutigkeit	14
2.3.3 Konvergenz eines Iterationsverfahrens, Fehlerabschätzungen, Rechnungsfehler	15
2.3.4 Praktische Durchführung	18
2.4 Konvergenzordnung eines Iterationsverfahrens	20
2.5 Newtonsche Verfahren	22
2.5.1 Das Newtonsche Verfahren für einfache Nullstellen, gedämpftes Newton-Verfahren	22
2.5.2 Das Newtonsche Verfahren für mehrfache Nullstellen; das modifizierte Newtonsche Verfahren	24
2.6 Regula falsi	26
2.6.1 Regula falsi für einfache Nullstellen	26
2.6.2 Modifizierte Regula falsi für mehrfache Nullstellen	27
2.6.3 Primitivform der Regula falsi	27
2.7 Verfahren von Steffensen	28
2.7.1 Das Verfahren von Steffensen für einfache Nullstellen	28
2.7.2 Das modifizierte Steffensen-Verfahren für mehrfache Nullstellen	28

	Seite	
2.8	Einschlußverfahren	29
2.8.1	Bisektionsverfahren	29
2.8.2	Das Pegasus-Verfahren	31
2.8.3	Verfahren von Anderson-Björck	32
2.8.4	Verfahren von King und Anderson-Björck-King	35
2.9	Effizienz der Verfahren und Entscheidungshilfen	35
3	Verfahren zur Lösung algebraischer Gleichungen	37
3.1	Vorbemerkungen	37
3.2	Das Hornerschema	38
3.2.1	Das einfache Horner-Schema für reelle Argumentwerte	38
3.2.2	Das einfache Horner-Schema für komplexe Argumentwerte	39
3.2.3	Das vollständige Horner-Schema für reelle Argumentwerte	41
3.2.4	Anwendungen	43
3.3	Methoden zur Bestimmung sämtlicher Lösungen algebraischer Gleichungen	44
3.3.1	Vorbemerkungen, Überblick und Entscheidungshilfen für die Wahl der Methode	44
3.3.2	Das Verfahren von Muller	45
3.3.3	Das Verfahren von Bauhuber	48
3.3.4	Das Verfahren von Jenkins und Traub	50
4	Direkte Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme	51
4.1	Aufgabenstellung	51
4.2	Definitionen und Sätze	52
4.3	Lösbarkeitsbedingungen für ein lineares Gleichungssystem	56
4.4	Prinzip der direkten Methoden	57
4.5	Der Gauß-Algorithmus	58
4.5.1	Gauß-Algorithmus mit Spaltenpivotsuche	58
4.5.2	Pivotsuche	62
4.5.3	Gauß-Algorithmus als Dreieckszerlegung	62
4.5.4	Gauß-Algorithmus für Systeme mit mehreren rechten Seiten	65

	Seite
4.6 Matrizeninversion mit dem Gauß-Algorithmus	66
4.7 Verfahren für Systeme mit symmetrischen Matrizen	67
4.7.1 Systeme mit symmetrischer, streng regulärer Matrix	67
4.7.2 Systeme mit symmetrischer, positiv definiter Matrix, Cholesky-Verfahren	68
4.8 Das Gauß-Jordan-Verfahren	71
4.9 Bestimmung der zu einer Matrix inversen Matrix mit dem Austauschverfahren	72
4.10 Gleichungssysteme mit tridiagonalen Matrizen	75
4.10.1 Systeme mit tridiagonaler Matrix	75
4.10.2 Systeme mit symmetrischer, tridiagonaler, positiv definiter Matrix	77
4.11 Gleichungssysteme mit zyklisch tridiagonalen Matrizen	79
4.11.1 Systeme mit zyklisch tridiagonaler Matrix	79
4.11.2 Systeme mit symmetrischer, zyklisch tridiagonaler Matrix	81
4.12 Gleichungssysteme mit fünfdiagonalen Matrizen	83
4.12.1 Systeme mit fünfdiagonalen Matrizen	83
4.12.2 Systeme mit symmetrischer, fünfdiagonaler, positiv definiter Matrix	85
4.13 Gleichungssysteme mit Bandmatrizen	87
4.14 Lösung überbestimmter linearer Gleichungssysteme mit Householdertransformation	93
4.15 Fehler, Kondition und Nachiteration	97
4.15.1 Fehler und Kondition	97
4.15.2 Möglichkeiten zur Konditionsverbesserung	99
4.15.3 Nachiteration	100
4.16 Gleichungssysteme mit Blockmatrizen	102
4.16.1 Vorbemerkungen	102
4.16.2 Gauß-Algorithmus für Blocksysteme	103
4.16.3 Gauß-Algorithmus für tridiagonale Blocksysteme	104
4.16.4 Weitere Block-Verfahren	105
4.17 Entscheidungshilfen für die Auswahl des Verfahrens	106

	Seite
5 Iterationsverfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme	108
5.1 Vorbemerkungen	108
5.2 Vektor- und Matrixnormen	108
5.3 Das Iterationsverfahren in Gesamtschritten	110
5.4 Das Iterationsverfahren in Einzelschritten oder das Gauß-Seidelsche Iterationsverfahren	114
5.5 Relaxation beim Gesamtschrittverfahren	115
5.6 Relaxation beim Einzelschrittverfahren	116
6 Systeme nichtlinearer Gleichungen	118
6.1 Allgemeines Iterationsverfahren	118
6.2 Spezielle Iterationsverfahren	123
6.2.1 Newtonsche Verfahren für nichtlineare Systeme	123
6.2.1.1 Das quadratisch konvergente Newton-Verfahren	123
6.2.1.2 Gedämpftes Newton-Verfahren	124
6.2.2 Regula falsi für nichtlineare Systeme	126
6.2.3 Das Verfahren des stärksten Abstiegs (Gradientenverfahren)	127
6.2.4 Das Verfahren von Brown	129
6.3 Entscheidungshilfen für die Auswahl der Methode	129
7 Eigenwerte und Eigenvektoren von Matrizen	130
7.1 Definitionen und Aufgabenstellungen	130
7.2 Diagonalähnliche Matrizen	132
7.3 Das Iterationsverfahren nach v. Mises	133
7.3.1 Bestimmung des betragsgrößten Eigenwertes und des zugehörigen Eigenvektors	133
7.3.2 Bestimmung des betragskleinsten Eigenwertes	138
7.3.3 Bestimmung weiterer Eigenwerte und Eigenvektoren	139
7.4 Konvergenzverbesserung mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten im Falle Hermitescher Matrizen	139
7.5 Das Verfahren von Krylov	140
7.5.1 Bestimmung der Eigenwerte	141
7.5.2 Bestimmung der Eigenvektoren	143

	Seite
7.6 Bestimmung der Eigenwerte positiv definiten, symmetrischer, tridiagonaler Matrizen mit Hilfe des QD-Algorithmus	143
7.7 Transformation auf Hessenbergform, LR- und QR-Verfahren	145
7.7.1 Transformation einer Matrix auf obere Hessenbergform	145
7.7.2 LR-Verfahren	147
7.7.3 QR-Verfahren	148
7.8 Eigenwerte und Eigenvektoren einer Matrix nach dem Verfahren von Martin, Parlett, Peters, Reinsch und Wilkinson	149
7.9 Entscheidungshilfen	151
8 Lineare und nichtlineare Approximation	152
8.1 Lineare Approximation	153
8.1.1 Approximationsaufgabe und beste Approximation	153
8.1.2 Kontinuierliche lineare Approximation im quadratischen Mittel	156
8.1.3 Diskrete lineare Approximation im quadratischen Mittel	160
8.1.3.1 Normalgleichungen für den diskreten linearen Ausgleich	160
8.1.3.2 Diskreter Ausgleich durch algebraische Polynome unter Verwendung orthogonaler Polynome	163
8.1.3.3 Lineare Regression, Ausgleich durch lineare algebraische Polynome	165
8.1.3.4 Householdertransformation zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems	166
8.1.4 Approximation von Polynomen durch Tschebyscheff-Polynome	168
8.1.4.1 Beste gleichmäßige Approximation, Definition	169
8.1.4.2 Approximation durch Tschebyscheff-Polynome	170
8.1.5 Approximation periodischer Funktionen	176
8.1.5.1 Approximation periodischer Funktionen im quadratischen Mittel	177
8.1.5.2 Trigonometrische Interpolation	177
8.1.5.3 Komplexe diskrete Fourier-Transformation (FFT)	180

	Seite
8.2 Nichtlineare Approximation	182
8.2.1 Transformationsmethode beim nichtlinearen Ausgleich	182
8.2.2 Nichtlinearer Ausgleich im quadratischen Mittel	184
8.3 Entscheidungshilfen	185
9 Polynomiale und rationale Interpolation	186
9.1 Aufgabenstellung	186
9.2 Interpolationsformeln von Lagrange	187
9.2.1 Lagrangesche Formel für beliebige Stützstellen	187
9.2.2 Lagrangesche Formel für äquidistante Stützstellen	188
9.3 Das Interpolationsschema von Aitken für beliebige Stützstellen	189
9.4 Inverse Interpolation nach Aitken	191
9.5 Interpolationsformeln von Newton	192
9.5.1 Newtonsche Formel für beliebige Stützstellen	192
9.5.2 Newtonsche Formel für äquidistante Stützstellen	194
9.6 Restglied der Interpolation und Aussagen zur Abschätzung und Schätzung des Interpolationsfehlers	195
9.7 Interpolationsformeln von Lagrange bei Funktionen mehrerer Veränderlichen	197
9.8 Rationale Interpolation	199
9.9 Entscheidungshilfen für die Auswahl des zweckmäßigen Interpolationsverfahrens	203
10 Interpolierende Polynomsplines zur Konstruktion glatter Kurven	204
10.1 Polynomsplines dritten Grades	204
10.1.1 Definition der Splinefunktionen	205
10.1.2 Berechnung der nichtparametrischen kubischen Splines	207
10.1.3 Berechnung der parametrischen kubischen Splines	212
10.1.4 Kombinierte interpolierende Splines	214
10.1.5 Konvergenz und Fehlerabschätzung interpolierender kubischer Splines	220

	Seite
10.2 Hermite-Splines fünften Grades	221
10.2.1 Definition der Hermite-Splines	221
10.2.2 Berechnung der nichtparametrischen Hermite-Splines	223
10.2.3 Berechnung der parametrischen Hermite-Splines	227
10.3 Entscheidungshilfen zur Auswahl der geeigneten Spline- methode zur Konstruktion glatter Kurven bzw. Flächen	230
11 Polynomiale Ausgleichssplines dritten Grades zur Konstruktion glatter Kurven	234
11.1 Problemstellung	234
11.2 Definition der Splinefunktionen	235
11.3 Berechnung der nichtparametrischen kubischen Ausgleichs- splines	236
11.4 Berechnung der parametrischen kubischen Ausgleichssplines	244
12 Zweidimensionale Splines, Bezier-Splines, Oberflächensplines	245
12.1 Interpolierende zweidimensionale Polynom-Splines dritten Grades zur Konstruktion glatter Flächen	245
12.2 Kubische und bikubische interpolierende und approximierende Bezier-Splines	255
12.2.1 Kubische Bezier-Splines zur Konstruktion glatter Kurven und Kurven mit Knick	256
12.2.2 Approximierende bikubische Bezier-Splines zur Konstruktion glatter Flächen	259
12.2.3 Modifizierte (interpolierende) kubische Bezier- Splines	266
12.3 Zweidimensionale interpolierende Oberflächensplines	267
13 Numerische Differentiation	270
13.1 Aufgabenstellung	270
13.2 Differentiation mit Hilfe eines Interpolationspolynoms	270
13.3 Differentiation mit Hilfe interpolierender kubischer Polynom-Splines	275
13.4 Differentiation nach dem Romberg-Verfahren	275
13.5 Entscheidungshilfen	277

14 Numerische Quadratur	278
14.1 Vorbemerkungen	278
14.2 Konstruktion von Interpolationsquadraturformeln	280
14.3 Newton-Cotes-Formeln	282
14.3.1 Die Sehnentrapezformel	283
14.3.2 Die Simpsonsche Formel	285
14.3.3 Die 3/8-Formel	287
14.3.4 Weitere Newton-Cotes-Formeln	289
14.3.5 Zusammenfassung zur Fehlersuche von Newton-Cotes- Formeln	291
14.4 Quadraturformeln von Maclaurin	292
14.4.1 Die Tangententrapezformel	292
14.4.2 Weitere Maclaurin-Formeln	294
14.5 Die Euler-Maclaurin-Formeln	296
14.6 Tschebyscheffsche Quadraturformeln	298
14.7 Quadraturformeln von Gauß	301
14.8 Einfache Berechnung von Gewichten und Stützstellen ver- allgemeinerter Gauß-Quadraturformeln	305
14.9 Quadraturformeln von Clenshaw-Curtis	308
14.10 Das Verfahren von Romberg	310
14.11 Fehlerschätzung und Rechnungsfehler	312
14.12 Adaptive Quadraturverfahren	315
14.13 Konvergenz der Quadraturformeln	316
14.14 Berechnung des Riemannschen Flächenintegrals mit bi- kubischen Splines	316
14.15 Entscheidungshilfen für die Auswahl der geeigneten Methode	317
15 Anfangswertprobleme bei gewöhnlichen Differentialgleichungen	319
15.1 Problemstellung	319
15.2 Prinzip der numerischen Verfahren	320

	Seite	
15.3	Einschrittverfahren	322
15.3.1	Das Polygonzugverfahren von Euler-Cauchy	322
15.3.2	Das verbesserte Euler-Cauchy-Verfahren	323
15.3.3	Praediktor-Korrektor-Verfahren von Heun	323
15.3.4	Explizite Runge-Kutta-Verfahren	325
15.3.4.1	Konstruktion von Runge-Kutta-Verfahren	325
15.3.4.2	Klassisches Runge-Kutta-Verfahren	326
15.3.4.3	Zusammenstellung expliziter Runge-Kutta- Formeln	328
15.3.4.4	Einbettungsformeln	333
15.3.5	Implizite Runge-Kutta-Verfahren	336
15.3.6	Gemeinsame Darstellung aller Einschrittverfahren	339
15.3.7	Fehlerschätzung und Schrittweitensteuerung	340
15.3.7.1	Fehlerschätzung	340
15.3.7.2	Methoden zur automatischen Schrittweiten- steuerung, adaptive Anfangswertproblemlöser	342
15.4	Mehrschrittverfahren	344
15.4.1	Prinzip der Mehrschrittverfahren	344
15.4.2	Das explizite Verfahren von Adams-Bashforth	346
15.4.3	Das Praediktor-Korrektor-Verfahren von Adams-Moulton	348
15.4.4	Verfahren von Adams-Störmer	353
15.4.5	Fehlerschätzungsformeln für Mehrschrittverfahren	354
15.4.6	Rechnungsfehler für Ein- und Mehrschrittverfahren	356
15.5	Extrapolationsverfahren von Bulirsch-Stoer-Gragg	357
15.6	Stabilität	360
15.6.1	Vorbemerkungen	360
15.6.2	Stabilität der Differentialgleichungen	361
15.6.3	Stabilität des numerischen Verfahrens	361
15.7	Steife Differentialgleichungssysteme	366
15.7.1	Problemstellung	366

	Seite
15.7.2 Kriterien für Steifheit eines Systems	366
15.7.3 Das Verfahren von Gear zur Integration steifer Systeme	367
15.8 Entscheidungshilfen bei der Wahl des Verfahrens	373
16 Randwertprobleme bei gewöhnlichen Differentialgleichungen	378
16.1 Problemstellung	378
16.2 Zurückführung des Randwertproblems auf ein Anfangswertproblem	379
16.2.1 Randwertprobleme für nichtlineare Differentialgleichungen zweiter Ordnung	379
16.2.2 Randwertprobleme für Systeme von Differentialgleichungen erster Ordnung	382
16.2.3 Mehrzielverfahren	383
16.3 Differenzenverfahren	387
16.3.1 Das gewöhnliche Differenzenverfahren	387
16.3.2 Differenzenverfahren höherer Näherung	393
16.3.3 Iterative Auflösung der linearen Gleichungssysteme zu speziellen Randwertproblemen	396
16.3.4 Lineare Eigenwertprobleme	396
Anhang: FORTRAN 77- Programme	399
Verzeichnis der Programme	400
Vorwort zum Anhang	405
Programme	408
Literaturverzeichnis	714
Literatur zu weiteren Themengebieten	729
Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen	729
Methode der Finiten Elemente	730
Sachregister	733