Martin Hanke-Bourgeois

Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens

3. Auflage

STUDIUM

VIEWEG+
TEUBNER

Martin Hanke-Bourgeois

Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens

Martin Hanke-Bourgeois

Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens

3., aktualisierte Auflage

STUDIUM

VIEWEG+
TEUBNER

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über
<http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Prof. Dr. Martin Hanke-Bourgeois
Geboren 1961 in Frankfurt/Main. Von 1980 bis 1987 Studium der Mathematik, 1989 Promotion an der Universität Karlsruhe (TH), 1994 Habilitation. Von 1995 bis 1997 Lehrstuhlvertretung an der Universität Kaiserslautern. Seit 1999 Professor für Angewandte Mathematik an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz.

1. Auflage 2002
2., überarbeitete und erweiterte Auflage 2006
3., aktualisierte Auflage 2009

Dieses Werk ist ein Teil der Reihe Mathematische Leitfäden
(herausgegeben von Prof. Dr. Dr. h. c. mult. Gottfried Köthe; Prof. Dr. Klaus-Dieter Bierstedt, Universität Paderborn; Prof. Dr. Günther Trautmann, Universität Kaiserslautern)

Lektorat: Ulrike Schmickler-Hirzebruch | Nastassja Vanselow

Vieweg+Teubner ist Teil der Fachverlagsgruppe Springer Science+Business Media.
www.viewegteubner.de

Umschlaggestaltung: KünkelLopka Medienentwicklung, Heidelberg
Druck und buchbinderische Verarbeitung: STRAUSS GMBH, Mörlenbach
Gedruckt auf säurefreiem und chlorfrei gebleichtem Papier.
Printed in Germany

ISBN 978-3-8348-0708-3

Vorwort

Dieses Buch ist aus mehreren Vorlesungszyklen *Numerische Mathematik* hervorgegangen, die ich an den Universitäten in Karlsruhe, Kaiserslautern und Mainz gehalten habe. Im Gegensatz zu vielen anderen Lehrbüchern enthält es neben den üblichen Algorithmen der numerischen linearen Algebra und der Approximation eine umfassende Einführung in die Verfahren zur Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen. Dies bietet den Vorteil, daß die bereitgestellten Grundlagen auf die fortgeschritteneren Kapitel abgestimmt sind und die Notationen der einzelnen Kapitel weitgehend übereinstimmen.

Die Numerische Mathematik steht heute mehr denn je in der Verantwortung, sich den vielfältigen mathematischen Herausforderungen aus den Ingenieur- und Naturwissenschaften zu stellen. In diesem Kontext ist die Fähigkeit zur adäquaten mathematischen Modellierung, zur algorithmischen Umsetzung und zur effizienten Implementierung gefordert, was häufig mit dem Schlagwort *Wissenschaftliches Rechnen* umschrieben wird. Diese Entwicklung darf sich nicht allein auf die Forschung beschränken, der Anwendungscharakter muß vielmehr schon in der Lehre betont werden, damit die Studierenden auf die entsprechenden beruflichen Anforderungen vorbereitet werden. Aus diesem Grund enthält das Buch zahlreiche konkrete Anwendungen der jeweiligen Lehrinhalte.

An vielen Hochschulen werden numerische Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen unterrichtet, bevor die Studierenden Gelegenheit haben, die Lösungstheorie dieser Gleichungen kennenzulernen. Um dennoch ein tiefergehendes Verständnis zu ermöglichen, enthält das Buch drei Modellierungskapitel, die die wichtigsten Differentialgleichungen einführen. In meinen eigenen Vorlesungen habe ich solche Beispiele den jeweiligen Differentialgleichungskapiteln vorangestellt. Alternativ kann dieser Teil jedoch auch für eine unabhängige Modellierungsvorlesung oder ein ergänzendes Seminar verwendet werden.

Damit der Umfang des Buchs in einem vertretbaren Rahmen blieb, mußte an anderer Stelle gekürzt werden. Bisweilen habe ich deshalb bei der Auswahl des Stoffs auf gängige Resultate verzichtet, wenn mir ihr Anwendungsbezug nicht oder nicht mehr relevant zu sein schien. Natürlich sind diese Entscheidungen subjektiv gefärbt und lassen sich kontrovers diskutieren.

Die wichtigsten Algorithmen sind in einem Pseudocode formuliert, der sich an der Programmierumgebung MATLAB® orientiert.[1] MATLAB bietet den Vorteil, daß auch komplexere Algorithmen relativ schnell programmiert werden können. Dieser Zeitgewinn kann genutzt werden, um die Grenzen numerischer Verfahren experimentell auszutesten. Die Übungsaufgaben zu den einzelnen Kapiteln enthalten entsprechende Programmieraufgaben. MATLAB kann problemlos in den Übungen vorlesungsbegleitend eingeführt werden, als ergänzende Literatur empfehle ich die Bücher von Überhuber und Katzenbeisser [103] oder Higham und Higham [54]. Es sei angemerkt, daß auch fast alle Beispiele und Abbildungen des Buchs mit MATLAB erstellt wurden; The MathWorks, Inc., möchte ich an dieser Stelle für die Unterstützung danken.

Damit bin ich bei den Danksagungen angelangt, doch die Liste der vielen Studierenden, Kollegen und Freunde, die mit Rat und Tat zur Seite gestanden haben, ist derart umfangreich geworden, daß hier nicht alle erwähnt werden können. Ihnen allen ein herzliches Dankeschön. Besonderen Dank schulde ich meinen Mitarbeiter/innen Dr. M. Brühl, M. Geisel und B. Schappel, die unwahrscheinlich viel Zeit in die Korrektur des Manuskripts und die Auswahl der Übungsaufgaben investiert haben. Vor allem Herrn Dr. Brühl möchte ich dafür danken, daß ich in ihm einen Ansprechpartner hatte, den ich jederzeit in – zum Teil erschöpfende – Diskussionen über einzelne Abschnitte des Manuskripts verwickeln konnte. Zudem waren seine LaTeX-Kenntnisse eine unschätzbare Hilfe für mich.

Außerdem möchte ich namentlich den Kollegen M. Eiermann, M. Hochbruck, C. Lubich und C.-D. Munz für ihre Vorlesungsmanuskripte danken, die sich als äußerst hilfreich erwiesen haben. Frau Hochbruck hat darüber hinaus viele Teile des Manuskripts gelesen und in Vorlesungen „erprobt“. Ihre Ratschläge waren ausgesprochen hilfreich.

In die zweite und dritte Auflage wurden neben einigen neuen Aufgaben zahlreiche Korrekturen und kleinere Verbesserungen aufgenommen. Ich danke für die zahlreichen Vorschläge und Hinweise, die diesbezüglich an mich herangetragen worden sind. Über die sehr positiven Reaktionen auf dieses Buch habe ich mich sehr gefreut.

Mainz, im November 2008 Martin Hanke-Bourgeois

[1]MATLAB ist ein eingetragenes Warenzeichen von The MathWorks, Inc.

Inhalt

Einleitung

Die Aufgabe der *Numerischen Mathematik* besteht in der konkreten (zahlenmäßigen) Auswertung mathematischer Formeln beziehungsweise in der expliziten Lösung mathematischer Gleichungen; die Kapitelüberschriften dieses Buches geben einen Hinweis auf die vielfältigen Fragestellungen.

In der Regel ist das Ziel die Realisierung einer Rechenvorschrift (eines Algorithmus) auf einem Computer. Dabei ergeben sich drei wesentliche Nebenbedingungen.

- Die zur Verfügung stehende Zahlenmenge ist endlich und die einzelnen Rechenoperationen können nur im Rahmen der Maschinengenauigkeit erfolgen.
- Der Speichervorrat ist endlich; von wichtigen Ausnahmen abgesehen, können Funktionen einer reellen oder komplexen Variablen nur approximativ im Computer dargestellt werden.
- Die Rechenzeit ist beschränkt, so daß die meisten Probleme in der zur Verfügung stehenden Zeit nur näherungsweise gelöst werden können.

Jede dieser Einschränkungen resultiert in entsprechenden Fehlern (*Rundungsfehler*, *Diskretisierungsfehler* und *Verfahrensfehler*), die im Einzelfall diskutiert und abgeschätzt werden müssen. Für die jeweilige Aufgabenstellung ist dann zu entscheiden, welcher Algorithmus mit den zur Verfügung stehenden Ressourcen die vorgegebene Genauigkeit mit dem geringsten Aufwand erzielt.

Dieses Anforderungsprofil bildet eine Schnittstelle zwischen Mathematik auf der einen und zahlreichen Anwendungsfächern auf der anderen Seite. Die Automobilindustrie, um ein erstes Beispiel anzuführen, simuliert heute Bremsmanöver und Crashtests im Computer lange bevor der erste Prototyp eines Fahrzeugs gebaut wird; die Simulationen verwenden Programmpakete zur numerischen Lösung gewöhnlicher und partieller Differentialgleichungen. Ein zweites Beispiel ist die medizinische Diagnostik, die mittlerweile zahlreiche Verfahren einsetzt, die ohne Mathematik und insbesondere ohne numerische Methoden undenkbar wären. Eine solche Anwendung, auf die wir gleich zurückkommen werden, ist die Computertomographie. Als drittes Beispiel seien die Wettervorhersage und die Klimaforschung erwähnt, bei der enorme Datenmengen und komplizierte Strömungsprobleme auf sehr unterschiedlichen Längenskalen zu bewältigen sind. Auch hier bestehen die wesentlichen Komponenten des mathematischen Modells aus partiellen Differentialgleichungen.

Die Rechnungen, die heute in der Wirtschaft, den Ingenieur- und den Naturwissenschaften am Computer durchgeführt werden, sind oftmals so komplex, daß eine vollständige Fehleranalyse nicht mehr möglich ist. In vielen Fällen werden numerische Ergebnisse berechnet und visualisiert, die allenfalls durch praktische Experimente plausibel gemacht werden können. Unter diesen Umständen ist es entscheidend, daß zumindest für repräsentative Modellgleichungen eine rigorose Analyse des Algorithmus vorgenommen wird.

Aus demselben Grund ist es auch unerläßlich, daß sich die Mathematik mit dem Modellbildungsprozeß *per se* auseinandersetzt. Umgekehrt muß die Modellierung gerade bei großen Simulationen auch wichtige numerische Fragestellungen berücksichtigen, etwa welche Vereinfachungen vorgenommen werden können, damit realistische Ergebnisse überhaupt erst berechenbar werden.

Die Numerische Mathematik muß sich somit heute nicht mehr nur mit dem Entwurf konkreter Algorithmen für überschaubare Teilprobleme und deren Fehleranalyse beschäftigen, sondern sich einem wesentlich vielfältigeren Aufgabenspektrum stellen, welches unter dem Begriff *Wissenschaftliches Rechnen* zusammengefaßt wird. Dieses Aufgabenspektrum reicht von der aktiven Mitarbeit bei der mathematischen und numerischen Modellierung, über die Auswahl und vor allem die Kombination sinnvoller Lösungsverfahren

für die einzelnen Module des Projekts, bis schließlich hin zu umfangreichen Testläufen mit real vorgegebenen Eingabedaten. Gerade dieses letzte Stadium eines interdisziplinären Vorhabens ist in seiner Bedeutung und seinen Schwierigkeiten nicht zu unterschätzen: Der Mathematiker muß insbesondere in der Lage sein, die Ergebnisse der Simulationen im physikalischen Kontext zu interpretieren und ein von den vorher durchgeführten Modellrechnungen abweichendes Verhalten des Programms zu erkennen.

Der Begriff des Wissenschaftlichen Rechnens wird gelegentlich noch weiter ausgelegt und umfaßt dann auch verschiedene Teilgebiete, die in die Informatik hineinreichen; stellvertretend seien hier Programmpakete zur Automatischen Differentiation und die Implementierung trickreicher Algorithmen für Hochleistungsrechner (Parallelrechner oder Vektorrechner) angeführt. Derartige Aspekte des Wissenschaftlichen Rechnens werden trotz ihrer offensichtlichen Bedeutung in diesem Buch nicht berücksichtigt, um dessen Umfang nicht über Gebühr zu strapazieren.

Am Beispiel der *Computertomographie* soll im folgenden die Arbeitsweise im Wissenschaftlichen Rechnen veranschaulicht werden. Abbildung 0.1 zeigt ei-