

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

Jürgen Appell, Martin Väth

Elemente der Funktionalanalysis

Harro Heuser

Funktionalanalysis

Wolfgang Fischer und Ingo Lieb

Funktionentheorie

Lars Grüne, Oliver Junge

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Harro Heuser

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Günther J. Wirsching

Gewöhnliche Differentialgleichungen

Etienne Emmrich

Gewöhnliche und Operator-Differentialgleichungen

Matthias Bolhöfer, Volker Mehrmann

Numerische Mathematik

Martin Hanke-Bourgeois

**Grundlagen der Numerischen Mathematik
und des Wissenschaftlichen Rechnens**

Gerhard Opfer

Numerische Mathematik für Anfänger

Robert Plato

Numerische Mathematik kompakt

Hans-Rudolf Schwarz, Norbert Köckler

Numerische Mathematik

Andreas Meister

Numerik linearer Gleichungssysteme

Stefan Sauter, Christoph Schwab

Randelementmethoden

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)

Alle Rechte vorbehalten

© Vieweg+Teubner | GWV Fachverlage GmbH, Wiesbaden 2009

Lektorat: Ulrike Schmickler-Hirzebruch | Nastassja Vanselow

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

www.viewegteubner.de



Das Werk einschließlich aller seiner Teile ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes ist ohne Zustimmung des Verlags unzulässig und strafbar. Das gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in diesem Werk berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, dass solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürfen.

Umschlaggestaltung: KünkelLopka Medienentwicklung, Heidelberg

Druck und buchbinderische Verarbeitung: STRAUSS GMBH, Mörlenbach

Gedruckt auf säurefrei 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 fortgeschrittenen 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 L^AT_EX-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

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

Inhalt

Einleitung	11
I Zentrale Grundbegriffe	17
1 Rundungsfehler, Kondition und Stabilität	17
2 Vektor- und Matrixnormen	26
Algebraische Gleichungen	39
II Lineare Gleichungssysteme	41
3 Ein Beispiel aus der Mechanik	41
4 Die <i>LR</i> -Zerlegung	46
5 Die Cholesky-Zerlegung	59
6 Toeplitz-Systeme	64
7 Der Banachsche Fixpunktsatz	73
8 Drei einfache Iterationsverfahren	77
9 Das Verfahren der konjugierten Gradienten	85
10 Präkonditionierung	96
III Lineare Ausgleichsrechnung	107
11 Die Gaußschen Normalengleichungen	107
12 Singulärwertzerlegung und Pseudoinverse	111
13 Die <i>QR</i> -Zerlegung	119
14 Givens-Rotationen	128
15 Ein CG-Verfahren für das Ausgleichsproblem	133
16 Das GMRES-Verfahren	137

IV	Nichtlineare Gleichungen	149
17	Konvergenzbegriffe	149
18	Nullstellenbestimmung reeller Funktionen	158
19	Das Newton-Verfahren im \mathbb{R}^n	172
20	Das nichtlineare Ausgleichsproblem	177
21	Das Levenberg-Marquardt-Verfahren	185
V	Eigenwerte	199
22	Wozu werden Eigenwerte berechnet ?	199
23	Eigenwerteinschließungen	204
24	Kondition des Eigenwertproblems	212
25	Die Potenzmethode	218
26	Das QR -Verfahren	227
27	Implementierung des QR -Verfahrens	232
28	Das Jacobi-Verfahren	238
29	Spezielle Verfahren für hermitesche Tridiagonalmatrizen	245
30	Das Lanczos-Verfahren	259
Interpolation und Approximation		273
VI	Orthogonalpolynome	275
31	Innenprodukträume, Orthonormalbasen und Gramsche Matrizen	275
32	Tschebyscheff-Polynome	284
33	Allgemeine Orthogonalpolynome	288
34	Nullstellen von Orthogonalpolynomen	293
35	Anwendungen in der numerischen linearen Algebra	297
VII	Numerische Quadratur	317
36	Die Trapezformel	317
37	Polynominterpolation	321
38	Newton-Cotes-Formeln	324
39	Das Romberg-Verfahren	328
40	Gauß-Quadratur	336

41	Gauß-Legendre-Formeln	341
42	Ein adaptives Quadraturverfahren	348
VIII	Splines	355
43	Treppenfunktionen	355
44	Lineare Splines	357
45	Fehlerabschätzungen für lineare Splines	360
46	Kubische Splines	364
47	Fehlerabschätzung für kubische Splines	372
48	Geglättete kubische Splines	375
49	Numerische Differentiation	380
IX	Fourierreihen	389
50	Trigonometrische Polynome	389
51	Sobolevräume	393
52	Trigonometrische Interpolation	398
53	Schnelle Fouriertransformation	405
54	Zirkulante Matrizen	412
55	Symmetrische Transformationen	417
X	Multiskalenbasen	433
56	Das Haar-Wavelet	433
57	Semiorthogonale Spline-Wavelets	442
58	Biorthogonale Spline-Wavelets	449
59	Ein Anwendungsbeispiel	453
Mathematische Modellierung		463
XI	Dynamik	465
60	Populationsmodelle	465
61	Ein Modell für Aids	471
62	Chemische Reaktionskinetik	475
63	Mehrkörpersysteme	478

64	Elektrische Schaltkreise	487
XII	Erhaltungsgleichungen	495
65	Integrale und differentielle Erhaltungsform	495
66	Chromatographie	499
67	Strömungsmechanik	504
68	Schallwellen	511
XIII	Diffusionsprozesse	517
69	Brownsche Bewegung und Diffusion	517
70	Diffusion im Kraftfeld	524
71	Kontinuumsmechanik	531
72	Finanzmathematik	537
Gewöhnliche Differentialgleichungen		549
XIV	Anfangswertprobleme	551
73	Lösungstheorie	551
74	Das Euler-Verfahren	557
75	Das implizite Euler-Verfahren	560
76	Runge-Kutta-Verfahren	565
77	Stabilitätstheorie	578
78	Gauß-Verfahren	587
79	Radau-IIA-Verfahren	596
80	Rosenbrock-Typ-Verfahren	601
81	Schrittweitensteuerung	607
82	Differential-algebraische Gleichungen	615
XV	Randwertprobleme	629
83	Differenzenverfahren	629
84	Stabilitätsabschätzungen	636
85	Singulär gestörte Probleme	640
86	Adaptive Gitterverfeinerung	645

Inhalt	9	
87	Das Schießverfahren	651
88	Optimierungsrandwertaufgaben	657
Partielle Differentialgleichungen	667	
XVI	Elliptische Differentialgleichungen	669
89	Schwache Lösungen	669
90	Das Galerkin-Verfahren	678
91	Finite Elemente	683
92	Fehlerschranken für die Finite-Elemente-Methode	690
93	Die Steifigkeitsmatrix	692
94	Schnelle direkte Löser	702
95	Mehrgitterverfahren	706
96	Ein Fehlerschätzer	714
XVII	Parabolische Differentialgleichungen	723
97	Schwache Lösungen und Regularität	723
98	Die Linienmethode	727
99	Das Crank-Nicolson-Verfahren	733
100	Maximumprinzipien	737
101	Verfahren höherer Ordnung	743
102	Eine quasilineare Diffusionsgleichung	754
103	Schrittweitensteuerung und adaptive Gitter	761
XVIII	Hyperbolische Erhaltungsgleichungen	769
104	Die Transportgleichung	769
105	Die Methode der Charakteristiken	776
106	Schwache Lösungen und der Begriff der Entropie	780
107	Das Godunov-Verfahren	787
108	Differenzenverfahren in Erhaltungsform	794
109	Eine Ortsdiskretisierung höherer Ordnung	799
110	Zeitintegration des MUSCL-Schemas	805
111	Systeme von Erhaltungsgleichungen	811

Literaturverzeichnis	823
Sachverzeichnis	829

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 Programm pakete 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-