

Heidelberger Taschenbücher Band 105



Josef Stoer

Einführung in die Numerische Mathematik I

unter Berücksichtigung von Vorlesungen von
F. L. Bauer

Vierte, verbesserte Auflage

Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH 1983

Josef Stoer

Institut für Angewandte Mathematik
und Statistik der Universität Würzburg
Am Hubland
8700 Würzburg

AMS Subject Classification (1980)

65–01, 65–02, 65 B05, 65 B15, 65 D05, 65 D30, 65 D32, 65 F05,
65 F20, 65 F25, 65 F35, 65 G05, 65 H05, 65 H10

ISBN 978-3-540-12536-5

CIP-Kurztitelaufnahme der Deutschen Bibliothek

Stoer, Josef:

Einführung in die Numerische Mathematik: unter Berücks. von Vorlesungen
von F. L. Bauer/Josef Stoer.

Teil 2 verf. von J. Stoer u. R. Bulirsch. – Teilw. mit d. Erscheinungsorten:

Berlin, Heidelberg, New York

NE: Bulirsch, Roland:

1.–4., verb. Aufl. – 1983.

(Heidelberger Taschenbücher; Bd. 105)

ISBN 978-3-540-12536-5

ISBN 978-3-662-06862-5 (eBook)

DOI 10.1007/978-3-662-06862-5

NE: GT

Das Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte,
insbesondere die der Übersetzung, des Nachdruckes, der Entnahme von Abbildungen,
der Funksendung, der Wiedergabe auf photomechanischem oder ähnlichem Wege
und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen bleiben, auch bei nur auszugs-
weiser Verwertung, vorbehalten. Die Vergütungsansprüche des § 54, Abs. 2 UrhG
werden durch die „Verwertungsgesellschaft Wort“, München, wahrgenommen.

© Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972, 1976, 1979, 1983

Ursprünglich erschienen bei Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York Tokyo 1983

2144/3140-543210

Vorwort zur vierten Auflage

Bei der vorliegenden Neuauflage wurden neben den üblichen Berichtigungen wieder einige größere Änderungen und Ergänzungen vorgenommen. So wurde ein neuer Abschnitt über Hermite-Interpolation eingefügt, nicht nur um das Kapitel Interpolation weiter abzurunden, sondern auch wegen der Bedeutung der Hermite-Interpolation in der Theorie und Praxis von Variationsmethoden.

Größere Änderungen fielen im bisher sehr knappen Integrationskapitel an. Sie dienten neben einer breiteren Darstellung elementarer Integrationsformeln und einer besseren Beschreibung von Extrapolationsmethoden auch dazu, um zusätzlich die Peanosche Darstellung des Fehlers von Quadraturformeln anzugeben.

Schließlich wurde in dem Kapitel über lineare Gleichungssysteme die Beschreibung von Phase I der Simplexmethode verbessert.

Zahlreichen Kollegen, insbesondere aber Herrn Prof. Dr. K. Schittkowski, bin ich für Verbesserungsvorschläge und Hinweise auf Druckfehler dankbar.

Nicht zuletzt gilt aber mein Dank Frau I. Brugger für Ihre Hilfe bei den Schreivarbeiten und dem Springer-Verlag für die gewohnte gute Zusammenarbeit.

Würzburg, im Mai 1983

J. Stoer

Vorwort zur dritten Auflage

Aus Anlaß der Neuauflage wurde der Text der zweiten Auflage zwar korrigiert, aber im wesentlichen ohne größere Änderungen übernommen. Eine Ausnahme bildet nur der Abschnitt 2.3.3, Algorithmen zur schnellen Fouriertransformation: Dieser Abschnitt wurde völlig neu gefaßt, um die Prinzipien der für die Anwendungen so bedeutsamen FFT-Verfahren besser als bisher zu beschreiben. Für diesbezügliche Anregungen bin ich den Herren Prof. P. Banderet, Neuchâtel, und Dr. W. Forst, Dortmund, zu Dank verpflichtet. Zahlreichen weiteren Kollegen, unter ihnen besonders Prof. M. B. Spijker, Leiden, und Prof. W. Gautschi, Lafayette, danke ich für die kritische Lektüre, Hinweise auf Druckfehler und viele Verbesserungsvorschläge.

Schließlich gilt wie immer mein Dank Frau I. Brugger für die Ausführung der Schreibarbeiten und dem Springer-Verlag für die ständige gute Zusammenarbeit.

Würzburg, im Januar 1979

J. Stoer

Vorwort zur zweiten Auflage

Bei Gelegenheit der zweiten Auflage wurde der Text an verschiedenen Stellen berichtigt und um einige neue Abschnitte erweitert. So wurden in das Kapitel 4, „lineare Gleichungssysteme“, neue Abschnitte über Pseudoinverse (4.8.5), Techniken zur Modifikation von Dreieckszerlegungen und unitären Zerlegungen von Matrizen (4.9), sowie als Anwendung davon, zwei Abschnitte (4.10, 4.11) über die Simplexmethode aufgenommen.

In Kapitel 5 wurde der Abschnitt 5.4 um einen Unterabschnitt (5.4.3) mit Hinweisen zur praktischen Realisierung des modifizierten Newton-Verfahrens und um eine Darstellung eines einschlägigen Rang-1-Verfahrens von Broyden erweitert. Schließlich werden in dem neuen Abschnitt 5.11 wichtige Methoden zur Lösung von Minimierungsproblemen ohne Nebenbedingungen beschrieben.

Schwerpunkt der Ergänzungen ist ohne Frage die Darstellung einiger für die Praxis besonders wichtiger Minimierungsverfahren, soweit sie sich zwanglos in eine Einführung in die numerische Mathematik einfügen. Leider haben diese Verfahren noch nicht in dem Umfang Eingang in die Lehrbücher für numerische Mathematik gefunden, wie es nicht nur nach Meinung des Verfassers wünschenswert und sachlich geboten wäre. Es war ein Ziel, diesen Mangel, auch der ersten Auflage dieser Einführung, zu beheben.

Herrn Professor Dr. R. Bulirsch und Herrn Professor Dr. F. Lempio möchte ich herzlich für die sorgfältige Durchsicht der Ergänzungen und vielen Verbesserungsvorschläge danken.

Schließlich gilt mein Dank Frau I. Brugger für das Schreiben des Manuskripts und dem Springer-Verlag für sein verständnisvolles Eingehen auf alle Ergänzungswünsche.

Würzburg, im März 1976

J. Stoer

Vorwort zur ersten Auflage

Dieses Buch gibt den Stoff des ersten Teils einer zweisemestrigen Einführungsvorlesung in die Numerische Mathematik wieder, die der Verfasser in den letzten Jahren an mehreren Hochschulen halten konnte. Neben der Beschreibung der theoretischen Grundlagen der Probleme und Methoden der numerischen Mathematik waren folgende Ziele für die Auswahl des Stoffes und seine Darstellung maßgeblich: Von den vielen Methoden der numerischen Mathematik sollten hauptsächlich diejenigen behandelt werden, die sich auch leicht auf Digitalrechnern realisieren lassen. Dementsprechend wird auf die algorithmische Beschreibung der Verfahren großer Wert gelegt — kritische Teile von Algorithmen werden häufig in Algol 60 beschrieben. Wenn mehrere Methoden zur Lösung eines Problems vorgestellt werden, wird gleichzeitig nach Möglichkeit versucht, diese Methoden bezüglich ihrer praktischen Brauchbarkeit zu vergleichen und die Grenzen ihrer Anwendbarkeit anzugeben. Bei diesen Vergleichen sollten nicht nur die Anzahl der Operationen, Konvergenzeigenschaften usw. eine Rolle spielen, wichtiger ist es, die numerische Stabilität der Algorithmen zu vergleichen, um einen Einblick in die Gründe für die Zuverlässigkeit oder Unzuverlässigkeit von Verfahren zu geben. Das Einleitungskapitel über Fehleranalyse spielt dabei eine besondere Rolle: In ihm werden die Begriffe der numerischen Stabilität und Gutartigkeit von Algorithmen, die nach Meinung des Verfassers im Zentrum der numerischen Mathematik stehen, präzisiert und ihre Wichtigkeit genauer, als dies vielfach noch üblich ist, begründet und dargestellt. Nicht zuletzt dienen zahlreiche Beispiele und Übungsaufgaben dazu, die numerischen und theoretischen Eigenschaften von Verfahren zu illustrieren.

Da eine auch nur annähernd vollständige Aufzählung und Beschreibung brauchbarer Methoden weder möglich noch beabsichtigt war, sei der interessierte Leser auf folgende Zeitschriften hingewiesen, in denen er zahlreiche weitere Algorithmen teilweise sogar in der Form von Algol- oder Fortran-Programmen beschrieben findet:

Numerische Mathematik, Communications of the ACM, Journal of the ACM, The Computer Journal, Computing, Mathematics of Computation, BIT, SIAM Journal on Numerical Analysis, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik.

Wegen ihrer Zuverlässigkeit werden insbesondere die Algol-Programme empfohlen, die in der Zeitschrift „Numerische Mathematik“ im Rahmen der sog. „Handbook Series“ erscheinen.

An Inhalt und Aufbau der diesem Buch zugrunde liegenden Vorlesung haben viele mitgewirkt. Insbesondere möchte ich dankbar den Einfluß von Professor Dr. F. L. Bauer und Professor Dr. R. Baumann anerkennen, auf deren Vorlesungsausarbeitungen ich mich stützen konnte. Darüber hinaus haben sie zusammen mit den Herren Professor Dr. R. Bulirsch und Dr. Chr. Reinsch mit wertvollen Verbesserungsvorschlägen zur Klärung einer Reihe von kritischen Punkten beigetragen.

Eine vorläufige Fassung des Buches entstand 1970 in Form eines Skriptums der Universität Würzburg unter der maßgeblichen Mitwirkung meiner Mitarbeiter Dipl.-Math. K. Butendeich, Dipl.-Phys. G. Schuller und Dipl.-Math. Dr. J. Zowe. Für ihre Einsatzbereitschaft, mit der sie bei der Redaktion der verschiedenen Fassungen des Manuskripts mithalfen, möchte ich Ihnen besonders herzlich danken. Nicht zuletzt gilt mein besonderer Dank Frau I. Brugger, die mit großer Gewissenhaftigkeit und Geduld die umfangreichen Schreivarbeiten ausführte.

Würzburg, im November 1971

J. Stoer

Inhaltsverzeichnis

1 Fehleranalyse	1
1.1 Zahldarstellung	1
1.2 Rundungsfehler und Gleitpunktrechnung	4
1.3 Fehlerfortpflanzung	8
1.4 Beispiele	19
Übungsaufgaben	27
Literatur	30
2 Interpolation	31
2.1 Interpolation durch Polynome	32
2.1.1 Theoretische Grundlagen. Die Interpolationsformel von Lagrange	32
2.1.2 Die Algorithmen von Neville und Aitken	33
2.1.3 Die Newtonsche Interpolationsformel. Dividierte Differenzen	37
2.1.4 Das Restglied bei der Polynominterpolation	41
2.1.5 Hermite-Interpolation	44
2.2 Interpolation mit rationalen Funktionen	49
2.2.1 Allgemeine Eigenschaften der rationalen Interpolation	50
2.2.2 Inverse und reziproke Differenzen. Der Thielesche Kettenbruch	53
2.2.3 Neville-artige Algorithmen	57
2.2.4 Anwendungen und Vergleich der beschriebenen Algorithmen	61
2.3 Trigonometrische Interpolation	63
2.3.1 Theoretische Grundlagen	63
2.3.2 Die Algorithmen von Goertzel und Reinsch	67
2.3.3 Algorithmen zur schnellen Fouriertransformation	71
2.3.4 Anwendungen: Näherungsweise Berechnung von Fourierkoeffizienten mittels Abmin- derungsfaktoren	76

2.4	Spline-Interpolation	81
2.4.1	Theoretische Grundlagen	82
2.4.2	Die Berechnung von Splinefunktionen	85
2.4.3	Konvergenzeigenschaften der Spline- funktionen	91
	Übungsaufgaben	95
	Literatur	104
3	Integration von Funktionen	106
3.1	Elementare Integrationsformeln. Fehlerabschätzungen.	106
3.2	Die Euler-Maclaurinsche Summenformel	114
3.3	Anwendung der Extrapolation auf die Integration	117
3.4	Allgemeines über Extrapolationsverfahren	122
3.5	Die Gaußsche Integrationsmethode	127
3.6	Integrale mit Singularitäten	136
	Übungsaufgaben	138
	Literatur	140
4	Lineare Gleichungssysteme	141
4.1	Gauß-Elimination. Dreieckszerlegung einer Matrix	141
4.2	Der Gauß-Jordan-Algorithmus	150
4.3	Das Cholesky-Verfahren	154
4.4	Fehlerabschätzungen	157
4.5	Rundungsfehleranalyse der Gaußschen Eliminationsmethode	165
4.6	Rundungsfehlereinfluß bei der Auflösung von gestaffelten Gleichungssystemen	170
4.7	Orthogonalisierungsverfahren. Die Verfahren von Householder und Schmidt	172
4.8	Ausgleichsrechnung	179
4.8.1	Das lineare Ausgleichsproblem. Die Normal- gleichungen	180
4.8.2	Orthogonalisierungsverfahren zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems	183
4.8.3	Die Kondition des linearen Ausgleichs- problems	184
4.8.4	Nichtlineare Ausgleichsprobleme	190
4.8.5	Die Pseudoinverse einer Matrix	192
4.9	Modifikationstechniken	194
4.10	Lineare Minimierungsprobleme. Die Simplexmethode.	203
4.11	Phase I der Simplexmethode	214
	Übungsaufgaben	217
	Literatur	222

5 Nullstellenbestimmung durch Iterationsverfahren.	
Minimierungsverfahren	224
5.1 Entwicklung von Iterationsverfahren	225
5.2 Allgemeine Konvergenzsätze	228
5.3 Die Konvergenz des allgemeinen Newton-Verfahrens	232
5.4 Ein modifiziertes Newton-Verfahren	236
5.4.1 Über die Konvergenz von Minimierungs- verfahren	237
5.4.2 Anwendung auf das modifizierte Newton- Verfahren	242
5.4.3 Hinweise zur praktischen Realisierung des modi- fizierten Newton-Verfahrens. Ein Rang-1-Ver- fahren von Broyden	246
5.5 Nullstellenbestimmung für Polynome. Das Newton- sche Verfahren	249
5.6 Sturmsche Ketten und Bisektionsverfahren	260
5.7 Das Verfahren von Bairstow	264
5.8 Genauigkeitsfragen bei der Nullstellenbestimmung von Polynomen	266
5.9 Interpolationsmethoden zur Bestimmung von Nullstellen	269
5.10 Die Δ^2 -Methode von Aitken	274
5.11 Minimierungsprobleme ohne Nebenbedingungen	279
Übungsaufgaben	287
Literatur	291
Namen- und Sachverzeichnis	293