Teil I

Motivation und Einordnung

1 Die Entwicklung des Rechnens

„Das Einmaleins ist mir bis auf diese Stunde nicht geläufig."

Franz Grillparzer

Die Geschichte der Menschheit ist untrennbar verbunden mit der Verwendung von Zahlen. Während Naturvölkern zum Rechnen die beiden Hände genügten, so ist die moderne Wissenschaft und Technik auf komplizierte Rechenverfahren angewiesen. Dabei haben sich Zahldarstellung, Rechenverfahren, Rechenmaschinen und technische Entwicklung, sowie der sich daraus ergebende gesellschaftliche Nutzen gegenseitig beeinflusst und vorangetrieben.

Bereits zu Beginn des 2. Jahrtausends v. Chr. kannten die babylonischen Mathematiker eine Zahlenschrift, die nur einen senkrechten Nagel für eine Eins und einen offenen Winkel für die 10 benutzte. Ein Nagel konnte dabei – je nach seinem Abstand zu den anderen Winkeln oder Nägeln – eine 1 oder eine 60 bedeuten. $3661 = 60 \cdot 60 + 60 + 1$ wurde so also durch drei Nägel mit Abstand angezeigt, während die drei Nägel ohne Abstand einfach für 3 standen. Das Problem der eindeutigen Darstellung der Zahl 3601 wurde fast 2000 Jahre später gelöst, indem man als Platzhalter für eine fehlenden Stelle zwei schräg hochgestellte Nägel einführte, also $3601 = 60 \cdot 60 + 0 \cdot 60 + 1$ durch zwei Nägel, getrennt durch die beiden hochgestellten Nägel markierte.

Im dritten Jahrhundert v. Chr. wurde in Nordindien ein Zehnersystem entwickelt, das für die Ziffern 1 bis 9 graphische Zeichen benutzte, und dabei für diese Ziffern in verschiedenen Zehnerpotenzen auch verschiedene Zeichen zur Verfügung hatte, also z.B. für 9, 90, 900, usw. jeweils ein eigenes Zeichen. Im 5. Jahrhundert n. Chr. fanden indische Mathematiker heraus, dass ihr Zahlensystem sich stark vereinfachen ließ, wenn man auf diese Unterscheidung der Potenzen verzichtete und statt dessen durch eine eigene neue Ziffer, die Null, die Auslassung einer Zehnerpotenz anzeigte. Das indische Wissen wurde durch Araber wie Mohammed Ibn Musa al-Charismi[1] nach Europa weitervermittelt. Anfang des 13. Jahrhunderts verbreitete vor allem der Mathematiker Leonardo Fibonacci aus Pisa die Kenntnis der arabischen Ziffern in seinem *‚liber abaci'*. Aus dem arabischen Wort *as-sifr* (die Leere) kreierte

[1] Von seinem Namen leitet sich der Begriff Algorithmus ab

er den lateinischen Namen zefirum, aus dem sich sowohl das Wort Ziffer, als auch das englische *‚zero‘* ableitet. Mit den indisch-arabischen Zeichen konnte sich so das schriftliche Rechnen langsam durchsetzen und die römischen Ziffern verdrängen. Aber selbst Adam Ries (1492 bis 1559) beschrieb in seinen Rechenbüchern neben dem schriftlichen Rechnen mit den arabischen Ziffern hauptsächlich noch das Rechnen mit Abakus, Linien und Steinen, das nur wenige, meist Verwaltungsbeamte, Kaufleute und Gelehrte beherrschten. So hatte die Notwendigkeit des Umgangs mit immer größeren Zahlen zu einer Zahldarstellung geführt, die mit der Einführung der Null die Grundlage legte, auf der sich einfachere Rechenverfahren durchsetzen und in der Bevölkerung verbreiten konnten.

Michael Stifel führte bereits kurze Zeit später die negativen Zahlen ein und prägte den Begriff Exponent. Lord John Napier (1550-1617) entdeckte den natürlichen Logarithmus und konnte auf Rechenstäbchen (den *Napier-Bones*) eine logarithmische Skala herstellen, die das Multiplizieren von Zahlen auf einfache Weise auf die Addition zurückführte[2]. Diese Napier Bones wurden 1650 von Edmund Gunter und William Oughtred zum ersten funktionsfähigen Rechenschieber verbessert und später von Isaac Newton und John Warner weiterentwickelt.

Die neue Zahldarstellung mit der Null ermöglichte auch das Automatiseren von Rechenschritten. So baute bereits 1623 Wilhelm Schickard in Tübingen die erste *‚Rechenuhr‘*, und daraufhin stellte 1642 Blaise Pascal das erste mechanische Rechenwerk für Addition und Subtraktion mit durchlaufendem Zehnerübertrag vor. Im Jahre 1671 entwickelte Gottfried Wilhelm Leibniz eine Rechenmaschine, die bereits alle vier Grundrechenarten beherrschte. Kurz darauf beschrieb er das binäre Zahlensystem, ohne das die heutige elektronische Datenverarbeitung nicht vorstellbar wäre. Im 19. Jahrhundert entwarf Charles Babbage eine Maschine, die sogar Logarithmen berechnen konnte. Außerdem plante er seine *‚Differenzmaschine Nr. 2‘*, die getrennte Baugruppen für Speicher und Rechenwerk und sogar ein Druckwerk vorsah. Diese Maschine sollte mittels Lochkarten gesteuert werden, die von Joseph-Marie Jacquard 1805 zur Steuerung von Webstühlen erfunden worden waren.

In der Zeit von 1848 bis 1850 entwickelte George Boole die ‚Boole'sche Algebra‘, die Grundlage der heutigen binären Rechenschaltungen. Die technische Entwicklung wurde vorangetrieben 1890 durch die Lochkartenmaschine von Herman Hollerith, die zur Volkszählung in den USA entwickelt wurde. In den dazugehörigen Lesegeräten steckten kleine Metallstäbe, die an den Stellen, wo die Karte gelocht war, einen Kontakt zuließen, so dass elektrischer Strom fließen konnte. Die Auswertung der Daten dauerte mit dieser Technik statt mehrerer Jahre nur einige Wochen.

Der Höhepunkt der mechanischen Rechenmaschinen war wohl mit dem ersten Taschenrechner, der Curta, erreicht. Im Konzentrationslager Buchen-

[2] Für positive Zahlen x und y können wir das Produkt $x \cdot y = \exp(\log(x)) \cdot \exp(\log(y)) = \exp(\log(x) + \log(y))$ auf die Addition $\log(x) + \log(y)$ zurückführen.

wald vollendete der jüdische Häftling Curt Herzstark die Pläne für seinen *‚Lilliput‘*-Rechner, der von der SS als Siegesgeschenk an den Führer vorgesehen war. Wieder in Freiheit wurde Herzstark in Liechtenstein Technischer Direktor der Cortina AG zur Herstellung und Vertrieb der Curta, einer verbesserten Form des Lilliput.

Zur gleichen Zeit setzte die Entwicklung der elektronischen Rechner ein. Konrad Zuse entwickelte 1941 mit der Zuse Z3 den ersten Relaisrechner. Dabei verwendete er als Kompromiss zwischen der Festkomma-Zahldarstellung, mit der problemlos addiert werden kann, und einer logarithmischen Darstellung, die das Multiplizieren vereinfacht, die heute übliche Gleitpunktdarstellung. 1946 stellte John von Neumann die Fundamentalprinzipien eines frei programmierbaren Rechners auf (Prozessor, Speicher, Programm und Daten im Prozessor). Der ENIAC[3] war im gleichen Jahr der erste Rechner, der Röhren verwendete. Die Telefunken TR 4 war der erste Computer auf der Basis von Transistor-Bausteinen. 1958 entstand der erste Chip, und 1967 eroberte der erste Taschenrechner den Markt. Neun Jahre später wurde der erste Home-Computer Apple geboren, und 1981 begann der Siegeszug des PC[4]. Inzwischen dokumentieren Schlagworte wie VLSI-Design, RISC-Architektur, Pipelining, Vektor- und Parallelrechner die rasante Entwicklung.

Mit dem frei programmierbaren Computer entfiel die Beschränkung auf wenige, einfache Grundrechenarten, wie sie noch mechanische Rechner prägte. Ein Computer kann eine riesige Zahl unterschiedlichste Kombinationen von Rechnungen in kürzester Zeit ausführen. Damit kommt der Software, also den Programmen, die diese Computer mit Anweisungen versorgen, eine immer größere Bedeutung zu. Es werden auch immer komplexere Algorithmen möglich, so dass ein Betriebssystem wie Windows 95 z.B. aus ca. 10 Millionen Zeilen Code besteht.

Für Aufgabestellungen, die die Leistungsfähigkeit von PC's weit übersteigen, werden heutzutage auch Supercomputer entwickelt, um immer größere und kompliziertere Fragestellungen in den Griff zu bekommen. Die Erstellung einer verlässlichen Wettervorhersage, aber auch Schach-Computer oder die Berechnung von immer mehr Stellen der Kreiszahl π sind Herausforderungen, die sowohl Hardware als auch Software vorantreiben. Getragen wird diese Entwicklung von der Erwartung, dass der Fortschritt in der Computerisierung auch der Menschheit dient.

Die Zukunft wird voraussichtlich stark geprägt von der weiteren Entwicklung des Computers. In ersten Ansätzen könnte die Zukunft dem DNS-Computer gehören, der mittels biologischer Prozesse Rechenaufgaben löst.

[3] *Electronic Numerical Integrater and Calculator*

[4] Computer kommt von lateinisch *‚computare‘*. Damit bezechneten die Römer das Zusammenzählen von Kerben, die man in Holz schnitzte (*putare* = schneiden) um einfache Rechnungen durchzuführen. In Zusammenhang mit Rechenmaschinen wurde das Wort compute zum ersten Mal von John Fuller zur Verwendung eines Rechenschiebers 1850 gebraucht

Einen alternativen Ansatz stellt der Quantencomputer dar, der auf der Basis von Energiezuständen von Atomen rechnet, und dadurch unvorstellbar viele Operationen parallel durchführen kann. Trotzdem wird das menschliche Gehirn der Ausgangspunkt bleiben, das sich als Rechner immer schnellere Supercomputer ausdenkt und realisiert. Auch auf diesen zukünftigen Rechenanlagen wird Numerische Mathematik betrieben werden.

2 Numerische Mathematik, Reine Mathematik und Informatik

> *„Wissenschaftliche Forschung läuft immer darauf hinaus, dass es plötzliche mehrere Probleme gibt, wo es früher ein einziges gegeben hat.“*
>
> Norman Mailer

2.1 Informatik als die Wissenschaft vom Computer

Versteht man die Informatik – wie im englischen Sprachgebrauch – als die „Wissenschaft vom Computer“ *(Computer Science)*, so ist durch diese Definition die Numerische Mathematik in natürlicher Weise darin eingeschlossen. Jeder, der mit dem Computer arbeitet, kommt daher auch direkt oder indirekt mit Grundverfahren der Numerik in Berührung. Dies gilt insbesondere für die Bereiche Zahldarstellung und -arithmetik, Bildverarbeitung, Computergraphik und Parallelrechner, die in beiden Fachgebieten behandelt werden. Andere Verfahren wie die Gauß-Elimination oder das Newton-Verfahren sind von so grundsätzlicher Bedeutung, dass sie jedem natur- oder ingenieurswissenschaftlich Tätigen geläufig sein sollten.

2.2 Informatik und Numerik im Wissenschaftlichen Rechnen

Ein großer Bereich, in dem Numeriker und Informatiker tätig sind, ist der Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens. Hier geht es darum, ein Anwendungsproblem fachübergreifend in Zusammenarbeit verschiedener Wissenschaften zu lösen. An der Wettervorhersage arbeiten z.B. Meteorologen, die gewisse Modelle und Zusammenhänge entwickeln, die das natürliche Wettergeschehen möglichst gut darstellen. In Zusammenarbeit mit Mathematikern werden diese Vorgänge dann durch physikalische Gesetze näherungsweise als mathematische Gleichungen geschrieben. Die Numerische Mathematik ist dafür zuständig, für diese komplizierten mathematischen Gleichungen Lösungsverfahren zu entwickeln, die dann in Zusammenarbeit mit Informatikern implementiert werden. Dazu ist es notwendig, dass die beteiligten Wissenschaftler über eine „gemeinsame Sprache“ verfügen und daher in den beteiligten Fächern „mitreden“ können.

Auf jeder dieser Abstraktionsstufen von der Natur bis zur Implementierung können Fehler und Unzulänglichkeiten auftreten. So kann das mathematische Modell zu grob sein, der numerische Algorithmus falsche Ergebnisse liefern, oder die Implementierung ineffizient sein. In einem solchen Fall muss jeweils das beteiligte Verfahren ausgetauscht oder verbessert werden.

Der Informatiker ist in diesem Prozess für die Effizienz der Implementierung verantwortlich; Stichworte sind hier Rechenzeit, Speicherverwaltung, Berücksichtigung von Cache-Effekten, Einsatz von Parallelrechnern. Daneben beschäftigt sich die Informatik aber auch mit Fragen der Entwicklung und dem Einsatz geeigneter Rechnerarchitekturen, Compiler, Programmiertechniken und Visualisationstools.

Der Numeriker beschäftigt sich u.a. mit der Entwicklung effizienter, schneller Algorithmen und Methoden, die das mathematische – zumeist kontinuierliche – Problem möglichst gut diskret approximieren. Besondere Aufmerksamkeit muss dabei auf Rechengenauigkeit und Rundungsfehlerentwicklung gelegt werden.

Im Wissenschaftlichen Rechnen treten auf jeder Ebene Fehler auf:

- Die Natur läßt sich offensichtlich nicht vollständig durch mathematische Gleichungen beschreiben; einige Effekte wie Reibung werden oft vernachlässigt oder die Größe des betrachteten Gebietes wird reduziert, um überhaupt bei der derzeitigen Rechnerkapazität und -geschwindigkeit eine Lösung in vernünftiger Zeit zu erhalten.
- Die kontinuierlichen Gleichungen werden diskretisiert, um z.B. Gleichungssysteme zu erhalten, die auf dem Rechner gelöst werden können. Hierbei tritt ein sogenannter Diskretisierungsfehler auf. Durch ungeschickte Wahl des Modells kann es passieren, dass das diskretisierte Modell zu Ergebnissen führt, die mit dem Ausgangsproblem nicht mehr übereinstimmen, die die Wirklichkeit also schlecht oder gar nicht beschreiben.
- Bei der numerischen Lösung des diskretisierten Problems können sich durch Rundungsfehler während der Berechnung so viele zusätzliche Fehler ansammeln, dass die berechneten Werte weit entfernt von der gesuchten Lösung des diskretisierten Problems sind.

Um in diesem Prozess der Modellierung auf jeder Stufe brauchbare Ergebnisse zu erhalten, werden also Wissenschaftler benötigt, die auch in der Numerischen Mathematik über Vorkenntnisse verfügen (genauso wie Mathematiker, Numeriker und Naturwissenschaftler, die zusätzlich auf dem Gebiet der Informatik ausgebildet sind).

2.3 Numerische Methoden in der Informatik

Auch in eigentlichen Kernbereichen der Informatik treten Probleme auf, die sich nur mit Mitteln der Numerik behandeln lassen. Als wichtigste Gebiete wären hier zu nennen:

- Implementierung mathematischer Funktionen
- Computergraphik (Darstellung von Objekten)
- Bildverarbeitung (Kompression, Analyse, Bearbeiten)
- Neuronale Netze (Lernverfahren)
- Information Retrieval (Vektorraummodell)
- Chip Design (Algebraische Differentialgleichungen)
- stochastische Automaten und Markov-Ketten (Prozessverwaltung, Warteschlangen)

Wir werden in den jeweiligen Kapiteln besonders Informatik-relevante Anwendungsbeispiele aus den oben genannten Bereichen präsentieren.

3 Benötigtes Grundwissen aus Informatik und Mathematik

„Der Anfang ist die Hälfte des Ganzen."

Aristoteles

3.1 Informatik

In einführenden Informatik-Vorlesungen wird üblicherweise die Zahldarstellung im Rechner behandelt. Entscheidend für uns ist dabei die Tatsache, dass ein endlicher Speicher selbstverständlich auch nur eine beschränkte Anzahl von Stellen einer potentiell unendlich langen Zahl aufnehmen kann. Die Anzahl der auf dem Computer darstellbaren Zahlen ist somit beschränkt. Damit unmittelbar verbunden sind Rundungsfehler, die beim Darstellen bzw. beim Rechnen mit beliebigen Zahlen unausweichlich auftreten werden.

Bei der Programmierung orientiert sich die Informatik an funktionalen, objekt-orientierten, maschinennahen und imperativen Sprachen. In der Numerik werden hauptsächlich einfache imperative Sprachen wie FORTRAN oder C verwendet, inzwischen aber auch verstärkt objekt-orientierte Sprachen (C++, JAVA). Die wesentlichen Befehle sind dabei `FOR`- und `WHILE`-Schleifen sowie die `IF`-Anweisung in Verbindung mit mehrdimensionalen Feldern (Arrays, Vektoren, Matrizen). Auch komplexe Zahlen können als Datentyp auftreten. In einzelnen Fällen spielen auch Rekursionen in Verbindung mit *divide-and-conquer*-Strategien eine wichtige Rolle.

Weitere Teilgebiete der Informatik mit direktem Bezug zur Numerik sind die Komplexitätstheorie und die Beschäftigung mit effizienten Algorithmen. Relevante Fragestellungen sind hier z.B. die Bestimmung der Zeit- und Speicherkomplexität wichtiger numerischer Verfahren.

3.2 Einordnung in die Mathematik

Die sogenannte „Reine Mathematik" liefert i.Allg. Aussagen über die Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen, die für die Konstruktion einer Lösung nur bedingt hilfreich sind. So kann es aus Sicht der Existenz- und Eindeutigkeitstheorie vollkommen genügen, eine Lösung in der Form

$$a = \int_0^\infty e^{-t^2} \mathrm{d}t, \qquad x = A^{-1}b \in \mathbb{R}^n \qquad \text{oder} \qquad y \text{ mit } f(y) = 0,$$

anzugeben, während der Anwender natürlich die Lösungszahlen a und y bzw. den Lösungsvektor x in expliziter Form benötigt. Auf dieser Basis lassen sich aber nur unbefriedigend quantitative Aussagen gewinnen. Daher wird es im Folgenden unsere Aufgabe sein, diese in expliziter Form anzugeben, und zwar möglichst exakt und möglichst effizient. In Computeralgebrasystemen wie MAPLE oder MATHEMATICA wird dieser Unterschied sehr deutlich: Bis zu einem gewissen Punkt ist es möglich, Ergebnisse formal implizit zu beschreiben; dann muss aber oft doch zu numerischen Rechnungen übergegangen werden, um quantitative Resultate zu erhalten.

Numerik lässt sich somit vereinfachend als die Wissenschaft umschreiben, die versucht, die mathematischen Probleme, die im Zusammenhang mit quantitativen Aussagen auftreten, möglichst effizient und exakt zu lösen.

Voraussetzung zum Verständnis dieses Buches sind nur elementare Vorkenntnisse aus der Mathematik, die normalerweise Stoff einführender Mathematikvorlesungen für Informatiker und Naturwissenschaftler sind. Darüber hinaus gehende, verwendete mathematische Hilsmittel sind im Anhang kurz und verständlich zusammengefasst. Dies sind im Wesentlichen:

- Ableitungen und Integrale,
- Taylor-Reihe und Mittelwertsatz,
- Matrizen und Normen,
- komplexe Zahlen.

3.3 Beziehung zu anderen natur- und ingenieurswissenschaftlichen Fachgebieten

Naturwissenschaftler und Ingenieure verfügen in der Regel über gute mathematische Vorkenntnisse, so dass die Lektüre des Buches auch für diesen Personenkreis ohne Schwierigkeiten möglich sein sollte. Viele der beschriebenen Anwendungsbeispiele sind außerdem eng verknüpft mit naturwissenschaftlichen oder technischen Fragestellungen, so dass sich das vorliegende Werk auch gerade für Studierende eignet, die nicht Mathematik oder Informatik studieren.