

Inhaltsverzeichnis

1 Darstellung von Zahlen und Fehleranalyse	
Kondition und Stabilität	1
1.1 Definition von Fehlergrößen	1
1.2 Dezimaldarstellung von Zahlen	3
1.3 Fehlerquellen	6
1.3.1 Eingabefehler	7
1.3.2 Verfahrensfehler	7
1.3.3 Fehlerfortpflanzung und die Kondition eines Problems	8
1.3.4 Rechnungsfehler und numerische Stabilität	10
1.4 Zählen von Operationen	12
2 Numerische Verfahren zur Lösung nichtlinearer Gleichungen	13
2.1 Aufgabenstellung und Anwendungsempfehlungen	13
2.2 Definitionen und Sätze über Nullstellen	14
2.3 Allgemeines Iterationsverfahren	15
2.3.1 Konstruktionsmethode und Definition	15
2.3.2 Existenz von Lösungen und Eindeutigkeit der Lösung	16
2.3.3 Konvergenz eines Iterationsverfahrens, Fehlerabschätzungen, Rechnungsfehler	18
2.3.4 Praktische Durchführung	20
2.4 Konvergenzordnung eines Iterationsverfahrens	23
2.4.1 Definition und Sätze	23
2.4.2 Experimentelle Bestimmung der Konvergenzordnung	25
2.5 Newtonsche Verfahren	25
2.5.1 Das Newtonsche Verfahren für einfache Nullstellen	25
2.5.2 Gedämpftes Newton-Verfahren	27

2.5.3 Das Newtonsche Verfahren für mehrfache Nullstellen. Das modifizierte Newtonsche Verfahren	28
2.6 Regula Falsi	29
2.6.1 Regula Falsi für einfache Nullstellen	29
2.6.2 Modifizierte Regula Falsi für mehrfache Nullstellen	30
2.6.3 Primitivform der Regula Falsi	30
2.7 Verfahren von Steffensen	31
2.7.1 Das Verfahren von Steffensen für einfache Nullstellen	31
2.7.2 Das modifizierte Steffensen-Verfahren für mehrfache Nullstellen	32
2.8 Einschlußverfahren	32
2.8.1 Das Bisektionsverfahren	33
2.8.2 Das Pegasus-Verfahren	34
2.8.3 Das Verfahren von Anderson-Björck	35
2.8.4 Die Verfahren von King und Anderson-Björck-King. Das Illinois-Verfahren	38
2.8.5 Das Zeroin-Verfahren	38
2.9 Effizienz der Verfahren und Entscheidungshilfen	39
3 Verfahren zur Lösung algebraischer Gleichungen	41
3.1 Vorbemerkungen	41
3.2 Das Horner-Schema	42
3.2.1 Das einfache Horner-Schema für reelle Argumentwerte	42
3.2.2 Das einfache Horner-Schema für komplexe Argumentwerte ..	43
3.2.3 Das vollständige Horner-Schema für reelle Argumentwerte ..	45
3.2.4 Anwendungen	47
3.3 Methoden zur Bestimmung sämtlicher Lösungen algebraischer Gleichungen	48
3.3.1 Vorbemerkungen	48
3.3.2 Das Verfahren von Muller	49
3.3.3 Das Verfahren von Bauhuber	52
3.3.4 Das Verfahren von Jenkins und Traub	53
3.3.5 Das Verfahren von Laguerre	54
3.4 Entscheidungshilfen	55
4 Direkte Verfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme .	57
4.1 Aufgabenstellung	57
4.2 Definitionen und Sätze	58

4.3 Lösbarkeitsbedingungen für ein lineares Gleichungssystem	64
4.4 Prinzip der direkten Methoden	65
4.5 Der Gauß-Algorithmus	66
4.5.1 Gauß-Algorithmus mit Spaltenpivotsuche	66
4.5.2 Pivotsuche	70
4.5.3 Gauß-Algorithmus als Dreieckszerlegung	71
4.5.4 Der Gauß-Algorithmus für Systeme mit mehreren rechten Seiten	73
4.6 Matrizeninversion mit dem Gauß-Algorithmus	74
4.7 Verfahren für Systeme mit symmetrischen Matrizen	75
4.7.1 Systeme mit symmetrischer, streng regulärer Matrix	76
4.7.2 Systeme mit symmetrischer, positiv definiter Matrix. Cholesky-Verfahren	76
4.7.3 Systeme mit symmetrischer, positiv definiter Matrix. Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren)	80
4.8 Das Gauß-Jordan-Verfahren	83
4.9 Bestimmung der zu einer Matrix inversen Matrix mit dem Austauschverfahren	84
4.10 Gleichungssysteme mit tridiagonalen Matrizen	87
4.10.1 Systeme mit tridiagonaler Matrix	87
4.10.2 Systeme mit symmetrischer, tridiagonaler, positiv definiter Matrix	89
4.11 Gleichungssysteme mit zyklisch tridiagonalen Matrizen	91
4.11.1 Systeme mit zyklisch tridiagonaler Matrix	91
4.11.2 Systeme mit symmetrischer, zyklisch tridiagonaler Matrix ..	93
4.12 Gleichungssysteme mit fünfdiagonalen Matrizen	96
4.12.1 Systeme mit fünfdiagonaler Matrix	96
4.12.2 Systeme mit symmetrischer, fünfdiagonaler, positiv definiter Matrix	98
4.13 Gleichungssysteme mit Bandmatrizen	101
4.14 Lösung überbestimmter linearer Gleichungssysteme mit Householdertransformation	106
4.15 Fehler, Kondition und Nachiteration	111
4.15.1 Fehler und Kondition	111
4.15.2 Konditionsschätzung	113
4.15.3 Möglichkeiten zur Konditionsverbesserung	116
4.15.4 Nachiteration	117
4.16 Gleichungssysteme mit Blockmatrizen	118

4.16.1 Vorbemerkungen	118
4.16.2 Gauß-Algorithmus für Blocksysteme	119
4.16.3 Gauß-Algorithmus für tridiagonale Blocksysteme	121
4.16.4 Weitere Block-Verfahren	121
4.17 Algorithmus von Cuthill-McKee für dünn besetzte, sym- metrische Matrizen	122
4.18 Entscheidungshilfen für die Auswahl des Verfahrens	127
5 Iterationsverfahren zur Lösung linearer Gleichungssysteme	131
5.1 Vorbemerkungen und Entscheidungshilfen	131
5.2 Vektor- und Matrixnormen	132
5.3 Das Iterationsverfahren in Gesamtschritten	133
5.4 Das Iterationsverfahren in Einzelschritten oder das Gauß-Seidelsche Iterationsverfahren	138
5.5 Relaxation beim Gesamtschrittverfahren	139
5.6 Relaxation beim Einzelschrittverfahren. SOR-Verfahren	140
5.6.1 Iterationsvorschrift	140
5.6.2 Schätzung des Relaxationskoeffizienten. Adaptives SOR-Verfahren	141
6 Systeme nichtlinearer Gleichungen	145
6.1 Allgemeines Iterationsverfahren für Systeme	145
6.2 Spezielle Iterationsverfahren	150
6.2.1 Newtonsche Verfahren für nichtlineare Systeme	150
6.2.1.1 Das quadratisch konvergente Newton-Verfahren	150
6.2.1.2 Gedämpftes Newton-Verfahren für Systeme	152
6.2.2 Regula Falsi für nichtlineare Systeme	153
6.2.3 Das Verfahren des stärksten Abstiegs (Gradienten- verfahren) für nichtlineare Systeme	155
6.2.4 Das Verfahren von Brown für Systeme	156
6.3 Entscheidungshilfen für die Auswahl der Methode	157
7 Eigenwerte und Eigenvektoren von Matrizen	159
7.1 Definitionen und Aufgabenstellungen	159
7.2 Diagonalähnliche Matrizen	161
7.3 Das Iterationsverfahren nach v. Mises	163
7.3.1 Bestimmung des betragsgrößten Eigenwertes und des zugehörigen Eigenvektors	163

7.3.2 Bestimmung des betragskleinsten Eigenwertes	167
7.3.3 Bestimmung weiterer Eigenwerte und Eigenvektoren	168
7.4 Konvergenzverbesserung mit Hilfe des Rayleigh-Quotienten im Falle hermitescher Matrizen	169
7.5 Das Verfahren von Krylov	170
7.5.1 Bestimmung der Eigenwerte	170
7.5.2 Bestimmung der Eigenvektoren	172
7.6 Bestimmung der Eigenwerte positiv definiter, symmetrischer, tridiagonaler Matrizen mit Hilfe des QD-Algorithmus	173
7.7 Transformationen auf Hessenbergform, LR- und QR-Verfahren	175
7.7.1 Transformation einer Matrix auf obere Hessenbergform	175
7.7.2 LR - Verfahren	177
7.7.3 QR - Verfahren	179
7.8 Eigenwerte und Eigenvektoren einer Matrix nach den Verfahren von Martin, Parlett, Peters, Reinsch und Wilkinson	180
7.9 Entscheidungshilfen	181
8 Lineare und nichtlineare Approximation	183
8.1 Lineare Approximation	185
8.1.1 Approximationsaufgabe und beste Approximation	185
8.1.2 Kontinuierliche lineare Approximation im quadratischen Mittel	187
8.1.3 Diskrete lineare Approximation im quadratischen Mittel ..	192
8.1.3.1 Normalgleichungen für den diskreten linearen Ausgleich ..	192
8.1.3.2 Diskreter Ausgleich durch algebraische Polynome unter Verwendung orthogonaler Polynome	195
8.1.3.3 Lineare Regression. Ausgleich durch lineare algebraische Polynome	197
8.1.3.4 Householdertransformation zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems	198
8.1.4 Approximation von Polynomen durch Tschebyscheff- Polynome	200
8.1.4.1 Beste gleichmäßige Approximation, Definition	201
8.1.4.2 Approximation durch Tschebyscheff-Polynome	202
8.1.5 Approximation periodischer Funktionen	208
8.1.5.1 Approximation periodischer Funktionen im quadratischen Mittel	209
8.1.5.2 Trigonometrische Interpolation	210

8.1.5.3 Komplexe diskrete Fourier-Transformation (FFT)	213
8.2 Nichtlineare Approximation	214
8.2.1 Transformationsmethode beim nichtlinearen Ausgleich	215
8.2.2 Nichtlinearer Ausgleich im quadratischen Mittel	217
8.3 Entscheidungshilfen	218
9 Polynomiale und rationale Interpolation	221
9.1 Aufgabenstellung zur Interpolation durch algebraische Polynome	221
9.2 Interpolationsformeln von Lagrange	223
9.2.1 Lagrangesche Formel für beliebige Stützstellen	223
9.2.2 Lagrangesche Formel für äquidistante Stützstellen	224
9.3 Das Interpolationsschema von Aitken für beliebige Stützstellen	225
9.4 Inverse Interpolation nach Aitken	227
9.5 Interpolationsformeln von Newton	228
9.5.1 Newtonsche Formel für beliebige Stützstellen	228
9.5.2 Newtonsche Formel für äquidistante Stützstellen	229
9.6 Restglied der Interpolation und Aussagen zur Abschätzung und Schätzung des Interpolationsfehlers	231
9.7 Rationale Interpolation	233
9.8 Interpolation bei Funktionen mehrerer Veränderlichen	237
9.8.1 Interpolationsformel von Lagrange bei Funktionen von zwei Veränderlichen	237
9.8.2 Shepard-Interpolation	239
9.9 Entscheidungshilfen für die Auswahl des zweckmäßigen Interpolationsverfahrens	243
10 Interpolierende Polynomsplines zur Konstruktion glatter Kurven	245
10.1 Polynomsplines dritten Grades	245
10.1.1 Definition der Splinefunktionen	246
10.1.2 Berechnung der nichtparametrischen kubischen Splines	248
10.1.3 Berechnung der parametrischen kubischen Splines	253
10.1.4 Kombinierte interpolierende Polynom-Splines	259
10.1.5 Konvergenz und Fehlerabschätzungen interpolierender kubischer Splines	265
10.2 Hermite-Splines fünften Grades	266
10.2.1 Definition der Hermite-Splines	266
10.2.2 Berechnung der nichtparametrischen Hermite-Splines	268

10.2.3 Berechnung der parametrischen Hermite-Splines	272
10.3 Entscheidungshilfen zur Auswahl der geeigneten interpolierenden oder approximierenden Splinemethode	275
11 Polynomiale Ausgleichssplines 3. Grades zur Konstruktion glatter Kurven	281
11.1 Problemstellung	281
11.2 Definition der Splinefunktionen	282
11.3 Berechnung der nichtparametrischen kubischen Ausgleichssplines	283
11.4 Berechnung der parametrischen kubischen Ausgleichssplines	290
11.5 Entscheidungshilfen	291
12 Zweidimensionale Splines, Oberflächensplines, Bézier-Splines, B-Splines	293
12.1 Interpolierende zweidimensionale Polynomsplines dritten Grades zur Konstruktion glatter Flächen	293
12.2 Zweidimensionale interpolierende Oberflächensplines	303
12.3 Bézier-Splines	307
12.3.1 Bézier-Spline-Kurven	307
12.3.2 Bézier-Spline-Flächen	311
12.3.3 Modifizierte (interpolierende) kubische Bézier-Splines	318
12.4 B-Splines	319
12.4.1 B-Spline-Kurven	319
12.4.2 B-Spline-Flächen	325
12.5 Entscheidungshilfen	330
13 Akima- und Renner-Subsplines	333
13.1 Akima-Subsplines	333
13.2 Renner-Subsplines	336
13.3 Abrundung von Ecken bei Akima- und Renner-Kurven	340
13.4 Näherungsweise Berechnung der Bogenlänge einer Kurve	341
13.5 Entscheidungshilfen	343
14 Numerische Differentiation	345
14.1 Aufgabenstellung	345
14.2 Differentiation mit Hilfe eines Interpolationspolynoms	346
14.3 Differentiation mit Hilfe interpolierender kubischer Polynom-Splines	350

14.4	Differentiation nach dem Romberg-Verfahren	350
14.5	Entscheidungshilfen	352
15	Numerische Quadratur	353
15.1	Vorbemerkungen	353
15.2	Konstruktion von Interpolationsquadraturformeln	355
15.3	Newton-Cotes-Formeln	357
15.3.1	Die Sehnentrapezformel	359
15.3.2	Die Simpsonsche Formel	360
15.3.3	Die 3/8-Formel	362
15.3.4	Weitere Newton-Cotes-Formeln	364
15.3.5	Zusammenfassung zur Fehlerordnung von Newton-Cotes-Formeln	366
15.4	Quadraturformeln von Maclaurin	367
15.4.1	Die Tangententrapezformel	367
15.4.2	Weitere Maclaurin-Formeln	368
15.5	Die Euler-Maclaurin-Formeln	370
15.6	Tschebyscheffsche Quadraturformeln	372
15.7	Quadraturformeln von Gauß	375
15.8	Einfache Berechnung von Gewichten und Stützstellen verallgemeinerter Gauß-Quadraturformeln	379
15.9	Quadraturformeln von Clenshaw-Curtis	383
15.10	Das Verfahren von Romberg	384
15.11	Fehlerschätzung und Rechnungsfehler	386
15.12	Adaptive Quadraturverfahren	389
15.13	Konvergenz der Quadraturformeln	390
15.14	Entscheidungshilfen für die Auswahl der geeigneten Methode ..	391
16	Numerische Kubatur	393
16.1	Problemstellung	393
16.2	Konstruktion von Interpolationskubaturformeln	396
16.3	Newton-Cotes-Formeln für rechteckige Integrationsbereiche ...	399
16.4	Newton-Cotes-Kubaturformeln für Dreiecksbereiche	404
16.5	Das Romberg-Kubaturverfahren für Rechteckbereiche	405
16.6	Gauß-Kubaturformeln für Rechteckbereiche	408
16.7	Gauß-Kubaturformeln für Dreiecksbereiche	410
16.7.1	Dreiecksbereiche mit achsenparallelen Katheten	410

16.7.2 Dreiecke in allgemeiner Lage	411
16.8 Berechnung des Riemannschen Flächenintegrals mit bikubischen Splines	412
16.9 Entscheidungshilfen	413
17 Anfangswertprobleme bei gewöhnlichen Differential- gleichungen	415
17.1 Problemstellung	415
17.2 Prinzip der numerischen Verfahren	416
17.3 Einschrittverfahren	418
17.3.1 Das Polygonzugverfahren von Euler-Cauchy	418
17.3.2 Das verbesserte Euler-Cauchy-Verfahren	419
17.3.3 Praediktor-Korrektor-Verfahren von Heun	420
17.3.4 Explizite Runge-Kutta-Verfahren	422
17.3.4.1 Konstruktion von Runge-Kutta-Verfahren	422
17.3.4.2 Klassisches Runge-Kutta-Verfahren	423
17.3.4.3 Zusammenstellung expliziter Runge-Kutta-Formeln	425
17.3.4.4 Einbettungsformeln	429
17.3.5 Implizite Runge-Kutta-Verfahren vom Gauß-Typ	442
17.3.6 Gemeinsame Darstellung aller Einschrittverfahren. Verfahrensfunktion eines Einschrittverfahrens. Konsistenz	444
17.3.7 Fehlerschätzung und Schrittweitensteuerung	446
17.3.7.1 Fehlerschätzung	446
17.3.7.2 Methoden zur automatischen Schrittweitensteuerung, adaptive Anfangswertproblemlöser	447
17.4 Mehrschrittverfahren	450
17.4.1 Prinzip der Mehrschrittverfahren	450
17.4.2 Das explizite Verfahren von Adams-Bashforth	452
17.4.3 Das Praediktor-Korrektor-Verfahren von Adams-Moulton .	454
17.4.4 Verfahren von Adams-Störmer	459
17.4.5 Fehlerschätzungsformeln für Mehrschrittverfahren	460
17.4.6 Rechnungsfehler für Ein- und Mehrschrittverfahren	462
17.5 Extrapolationsverfahren von Bulirsch-Stoer-Gragg	462
17.6 Stabilität	466
17.6.1 Vorbemerkungen	466
17.6.2 Stabilität der Differentialgleichung	466
17.6.3 Stabilität des numerischen Verfahrens	467

17.7 Steife Differentialgleichungssysteme	472
17.7.1 Problemstellung	472
17.7.2 Kriterien für Steifheit eines Systems	472
17.7.3 Das Verfahren von Gear zur Integration steifer Systeme ...	473
17.8 Entscheidungshilfen bei der Wahl des Verfahrens	479
18 Randwertprobleme bei gewöhnlichen Differential-	
 gleichungen	485
18.1 Problemstellung	485
18.2 Zurückführung des Randwertproblems auf ein	
Anfangswertproblem	486
18.2.1 Randwertprobleme für nichtlineare Differentialgleichungen	
zweiter Ordnung	486
18.2.2 Randwertprobleme für Systeme von Differential-	
gleichungen erster Ordnung	489
18.2.3 Mehrzielverfahren	490
18.3 Differenzenverfahren	494
18.3.1 Das gewöhnliche Differenzenverfahren	494
18.3.2 Differenzenverfahren höherer Näherung	500
18.3.3 Iterative Auflösung der linearen Gleichungssysteme	
zu speziellen Randwertproblemen	502
18.3.4 Lineare Eigenwertprobleme	503
Anhang: ANSI C - Programme	505
Vorwort zum Anhang	507
Informationen für Hochschulangehörige und Studenten	509
Inhaltsverzeichnis des Anhangs	511
ANSI C - Programme	515
Symbolverzeichnis des Anhangs	1069
Literaturverzeichnis	1075
Literatur zu weiteren Themengebieten	1095
- Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen	1095
- Methode der Finiten Elemente	1096
Sachwortverzeichnis	1101