

Skript Numerik I

von Prof. Dr. Luise Blank im WS14/15

Gesina Schwalbe

21. Januar 2015

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	5
2	Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden	13
2.1	Gaußsches Eliminationsverfahren	13
2.1.1	Vorwärtselimination	13
2.1.2	Rückwärtselimination	15
2.1.4	Weitere algorithmische Anmerkungen	16
2.1.7	Algorithmus: Gauß-Elimination zur Lösung von $Ax = b$	17
2.1.8	Rechenaufwand gezählt in „flops“	17
2.1.10	Allgemeines zur Aufwandsbetrachtung	18
2.1.11	Formalisieren des Gauß-Algorithmus: LR-Zerlegung	19
2.2	Gaußsches Eliminationsverfahren mit Pivotisierung	22
2.2.1	Spaltenpivotisierung	22
2.2.3	Algorithmus: Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung	24
2.2.5	Lösen eines Gleichungssystems $Ax = b$	27
3	Fehleranalyse	29
3.1	Zahlendarstellung und Rundungsfehler	29
3.1.3	Bit-Darstellung zur Basis 2	30
3.1.4	Verteilung der Maschinenzahlen	31
3.1.6	Rundungsfehler	32
3.1.8	Auslöschung von signifikanten Stellen	33
3.2	Kondition eines Problems	34
3.3	Stabilität von Algorithmen	46
3.3.13	Allgemeine Faustregeln für die LR-Zerlegung	52
3.4	Beurteilung von Näherungslösungen linearer GLS	53
4	Lineare Gleichungssysteme: Direkte Methoden (Fortsetzung)	55
4.1	Gaußsches Eliminationsverfahren mit Äquilibration und Nachiteration	55
4.1.1	Äquilibration der Zeilen	55
4.1.2	Äquilibration der Spalten	55
4.1.4	Nachiteration	56
4.2	Cholesky-Verfahren	56
4.2.3	Cholesky-Zerlegung	59
4.2.4	Rechenaufwand in flops	59

4.3	Lineare Ausgleichsprobleme	59
4.3.2	Lineares Ausgleichsproblem	61
4.3.5	Lösung der Normalgleichung	64
4.4	Orthogonalisierungsverfahren	66
4.4.1	Givens-QR-Algorithmus	69
4.4.3	Aufwand des Givens-QR-Algorithmus	70
4.4.5	Speicherung	74
4.4.6	Householder QR-Algorithmus	74
4.4.7	Berechnung von $Q^T b$	75
4.4.8	Aufwand für den Householder-QR-Algorithmus	75
5	Numerische Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme	77
5.1	Einführung	77
5.1.2	Das Bisektionsverfahren	78
5.2	Fixpunktiteration	79
5.3	Konvergenzordnung und Fehlerabschätzungen	83
5.4	Newton-Verfahren für skalare Gleichung	85
5.4.1	Iterationsschritt des Newton(-Kantorowitsch)-Verfahrens	86
5.4.5	Newton-Verfahren: Iterativer Linearisierungsprozess	88
5.4.7	Iterationsschritt des Sekantenverfahrens	89
5.5	Das Newton-Verfahren im Mehrdimensionalen	91
5.5.1	Iterationsschritt des Newton-Verfahrens	91
5.5.2	Newton-Verfahren	92
5.5.4	Aufwand pro Iteration	92
5.6	Abbruchkriterien beim Newton-Verfahren	94
5.6.1	Der Monotonietest	95
5.6.2	Kriterium für erreichte Konvergenz	95
5.7	Varianten des Newton-Verfahrens	96
5.7.1	Iterationsschritt des vereinfachten Newton-Verfahrens	96
5.7.2	Das Broyden-Verfahren	96
5.7.3	Das gedämpfte Newton-Verfahren	97
6	Interpolation	99
6.1	Polynom-Interpolation	100
6.1.3	Schema von Neville	102
6.1.4	Das Horner-Schema zur Auswertung $p(x)$	102
6.1.8	Das Schema der dividierten Differenzen	104
6.2	Stückweise polynomiale Approximation durch Splines	113
6.2.3	Nachteile der Splineraumbasis	114
6.2.6	Gestalt der B-Splines	116
6.2.8	Auswertung von s an der Stelle \bar{x}	120
6.2.13	Splineinterpolation allgemein	122
6.2.14	Lineare B-Splines	122
6.2.15	Kubische B-Spline-Interpolation	123

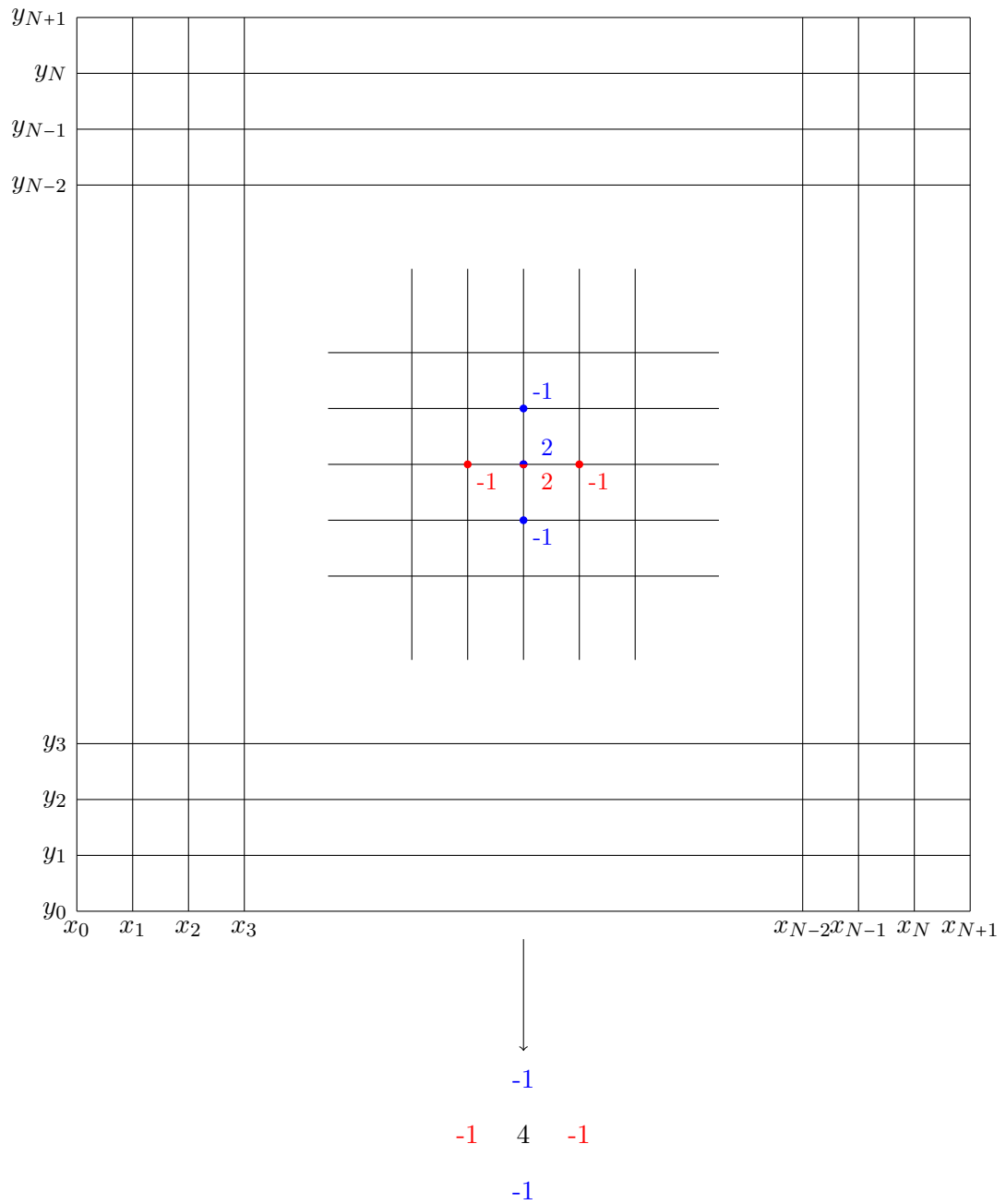
6.2.18	Berechnung der natürlichen Splines mittels B-Splines	125
7	Numerische Integration/Quadratur	129
7.1	Einführung und einfache Quadraturformeln	129
7.1.2	Mittelpunktregel	130
7.1.3	Trapezsumme	131
7.2	Interpolatorische Integrationsformeln	131
7.2.3	Newton-Cotes-Formeln	132
7.2.4	Tabelle (Newton-Cotes-Gewichte)	133
7.2.9	Tabelle: Fehler für Newton-Cotes-Formeln	135
7.2.10	Iterierte (wiederholte) Newton-Cotes-Formeln	136
7.2.12	Iterierte (oder summierte) Simpsonregel (Keplersche Fassregel) . .	137
7.3	Extrapolationsmethode und klassische Romberg-Quadratur	137
7.3.2	Idee der Extrapolation	138
7.3.4	Aufwand	139
7.3.5	Klassische Romberg-Folge zur Romberg-Quadratur	139
7.3.6	Bulirsch-Folge	140
7.3.7	Verfahren und Abbruch	140
7.4	Gauß-Quadratur und Orthogonalsysteme	143
7.4.1	Voraussetzungen an w	143
7.4.10	Vergleich und Bemerkungen	146
8	Eigenwertabschätzung	147
8.1	Eigenwertabschätzungen	147
8.2	Potenzmethode (Vektoriteration, power method)	148
8.2.1	Voraussetzung für die Potenzmethode	148
8.2.2	Vektoriteration	149
8.2.3	Direkte Potenzmethode/Vektoriteration	150
8.3	Inverse Vektoriteration	151
8.3.1	Inverse Vektoriterations mit Spektralverschiebung	152
8.4	Klassische (stationäre) Verfahren	154
9	Lineare Gleichungssysteme: Iterative Methoden	157
9.1	Einführung	157
9.1.2	Typische Aufgabenstellung	159
9.2	Klassische (stationäre) Verfahren	159
	Literatur	167

9 Lineare Gleichungssysteme: Iterative Methoden

9.1 Einführung

Beispiel 9.1.1 (Approximation der Poisson-Gleichung). Betrachte $\Delta u = u_{xx} - u_{yy} =: f$ in $\Omega = (0, 1)^2$ mit $u = 0$ auf $\delta\Omega$

Abb. 9.1.0 Gitter mit Unbekannten



Es gibt N^2 Unbekannte, $N^2 \times N^2$. Also $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit $n = N^2$.

$$(x_0, y_0), (x_1, y_0), (x_2, y_0), \dots, (x_{N+1}, y_0), (x_0, y_1), (x_1, y_1), \dots, (x_{N+1}, y_{N+1})$$

$$\Rightarrow 0 \dots 0 \underbrace{-1 \ 0 \dots 0 \ -1}_N \ 4 \underbrace{-1 \ 0 \dots 0 \ -1}_N \ 0 \dots 0 \quad i\text{-te Zeile von } A$$

Damit sind nur maximal 5 Elemente verschieden von Null je Zeile und Au benötigt ca. $5n = 5N^2$ Multiplikationen (statt $n^2 = N^4$).

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & -I & & 0 \\ -I & \ddots & \ddots & \\ & & -I & \\ 0 & & & A_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad A_{ii} = \begin{pmatrix} 4 & -1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n} \quad (9.1.1)$$

9.1.2 Typische Aufgabenstellung

Zu lösen ist $Ax = b$ mit

- $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, n sehr groß
- A dünn besetzt
- A hat Blockstruktur

s. Folien

9.2 Klassische (stationäre) Verfahren

Betrachte

$$Ax = b \quad (9.2.1)$$

Wähle nun für A eine **Aufspaltung** $A = M - N$ mit einer einfach invertierbaren Matrix M , s.d.

$$Mx = Nx + b \quad (9.2.2)$$

Die **Iterationsvorschrift** ist dann: Löse zu einem gegebenen Startwert $x^{(0)}$ als Schätzung für x für $k = 0, 1, 2, \dots$

$$Mx^{(k+1)} = Nx^{(k)} + b \quad (9.2.3)$$

Es ergeben sich folgende Äquivalenzen

$$(9.2.3) \Leftrightarrow x^{(k+1)} = M^{-1}Nx^{(k)} + M^{-1}b \quad (9.2.4)$$

$$\Leftrightarrow x^{(k+1)} = x^{(k)} + M^{-1}r^{(k)} \quad (9.2.5)$$

mit $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ (Residuum im k -ten Schritt).

Als **Abbruchkriterium**

a) sollte immer eine maximale Iterationszahl angegeben werden und

- b) wird oft für eine gegebene Toleranz $tol \geq \|r^{(k)}\|$ oder wie diskutiert $tol \cdot \|b\| \geq \|r^{(k)}\|$ verwendet.

Nach (9.2.4) ergibt sich also die **Fixpunktiteration**

$$x^{(k+1)} = Gx^{(k)} + d =: g(x^{(k)}) \quad (9.2.6)$$

zur **Fixpunktgleichung**

$$x^* = Gx^* + d = g(x^*)$$

mit der **Iterationsmatrix**

$$G = M^{-1}N = I - M^{-1}A = g'(x) \quad (9.2.7)$$

und $d = M^{-1}b$. Weiterhin folgt

$$x^{(k+1)} - x^* = G(x^{(k)} - x^*) = G^{k+1}(x^{(0)} - x^*)$$

und hiermit gilt elementweise (falls $x^{(0)} - x^* \notin \ker(G^{k+1})$)

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^* \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{k \rightarrow \infty} G^k = 0$$

Satz 9.2.1 (Konvergenzkriterien). *Sei $G \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:*

- i) Die Iteration (9.2.6) konvergiert für jeden Startwert $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$
- ii) Es gilt $\lim_{k \rightarrow \infty} G^k = 0$
- iii) Für den Spektralradius $\rho(G) := \max_i |\lambda_i|$ mit $\lambda_i \in \mathbb{C}$ Eigenwert zu G gilt

$$\rho(G) < 1 \quad (9.2.8)$$

Beweis. **i) \Leftrightarrow ii):** siehe oben.

ii) \Rightarrow iii): Ist $\rho(G) \geq 1$ dann existiert ein Eigenwert $\lambda \in \mathbb{C}$ mit $|\lambda| > 1$ und Eigenvektor $v \neq 0$ zu G . Damit ist $G^k v = \lambda^k v$. Mit $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda^k \neq 0$ (falls existent) folgt $\lim_{k \rightarrow \infty} G^k \neq 0$.

iii) \Rightarrow ii): Sei $\rho(G) < 1$. Da $(TGT^{-1})^k = TG^k T^{-1}$ für eine invertierbare Matrix T , reicht es, für die Jordansche Normalform $J = TGT^{-1}$ von G zu zeigen, dass $\lim_{k \rightarrow \infty} J^k = 0$

gilt. Da $J^k = \begin{pmatrix} J_1^k & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & J_m^k \end{pmatrix}$ mit den Jordankästchen $J_i = \begin{pmatrix} \lambda_i & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 \\ 0 & & & \lambda_i \end{pmatrix} =: \lambda_i I + S_i$

mit $S_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & 1 \\ & & & 0 \end{pmatrix}$ ist, ist nur $\lim_{k \rightarrow \infty} J_i^k$ zu untersuchen.

$$\begin{aligned} J_i^k &= (\lambda_i I + S_i)^k \\ &= \sum_{l=0}^k \binom{k}{l} \lambda_i^{k-l} S_i^l \\ &= \sum_{l=0}^{n-1} \binom{k}{l} \lambda_i^{k-l} S_i^l \end{aligned}$$

für $k \geq n$, da für $S_i \in \mathbb{R}^{r \times r}$ gilt $S_i^r = 0$ und mit $r \leq k$ ist dann $\lim_{k \rightarrow \infty} S_i^k = 0$. Weiterhin gilt $\binom{k}{l} \leq k^l$ und wegen $|\lambda_i| < 1$

$$\left| \binom{k}{l} \right| \cdot |\lambda_i^{k-l}| \leq |\lambda_i^k| \cdot \left| \frac{k}{\lambda_i} \right|^l \leq |\lambda_i|^k \cdot \left| \frac{k}{\lambda_i} \right|^n \xrightarrow{k \rightarrow \infty} 0$$

Also $J_i^k \rightarrow 0$ für $k \rightarrow \infty$.

□

Lemma 9.2.2. Für jede von einer Vektornorm induzierten Matrixnorm $\|\bullet\|$ gilt

$$\rho(G) \leq \|G\| \quad (9.2.9)$$

Beweis. Sei λ Eigenwert von G zum Eigenvektor v . Dann gilt $\frac{\|Gv\|}{\|v\|} = |\lambda|$ und daraus folgt direkt

$$\|G\| \geq \sup_{v \in V} \frac{\|Gv\|}{\|v\|} \geq |\lambda| \quad \forall \lambda$$

□

$\|G\| < 1$ ist meist leichter zu prüfen als $\rho(G) < 1$. Desweiteren gilt die Fehlerabschätzung

$$\|x^{(k)} - x^*\| \leq \|G\|^k \|x^{(0)} - x^*\| \quad (9.2.10)$$

für submultiplikative Matrixnormen.

Index

- Äquilibration
 - Spalten-, 55
 - Zeilen-, 55
- abgebrochene Potenz, 114
- Abstiegsrichtung, 97
- affin-invariant, 92
- Algorithmus, 48
- Approximationsfehler, 135
- Ausgleichsproblem
 - linear, 59, 61
- Banachscher Fixpunktsatz, 81
- Basis, 30
- Bildraum, 61
- Bisektionsverfahren, 78
- Broyden-Verfahren, 96
- Bulirsch-Folge, 140
- Cholesky-Zerlegung, 58, 59, 64
- de Boor-Punkte, 121
- dividierte Differenzen, 103
 - Fehlerdarstellung, 108
 - Leibnizregel, 105
 - Schema, 104
 - verallgemeinerte Form, 107
- double, 30
- Drei-Term-Rekursionsformel, 144
- Dreieckszerlegung, 13, 17
- elementar ausführbar, 48
- entkoppelt, 43
- Euler-Maclaurinsche Summenformel, 137
- Fehler, 29, 34
 - absoluter, 34
 - absoluter Rundungsfehler, 32
 - Fortpflanzung, 48
 - relativer, 34
- Fehlerschranke, 130
- Fixpunktiteration, 78, 79
- floating point, 29, 30
- floating point operations, 17
- flops, 17
- Frobeniusmatrix, 20
- Güte
 - Algorithmus, 50
- Gauß-Eliminator, 17
- Gaußsches Eliminationsverfahren, 13, 19
- Genauigkeit
 - Maschinengenauigkeit, 32
 - relative Rechengenauigkeit, 32
- Gerschgorin-Kreise, 147
- Givens-QR-Algorithmus, 69
- Givens-Rotation, 68
- Gleitkommazahl, 30
- Hamiltonsches Prinzip, 124
- Hermite-Interpolationspolynom, 106
- Horner-Schema, 102
- Householder Reflexion, 72
- Householdervektoren, 74
- Hutfunktion, 116
- Implementation, 48
- integer, 29
- Integrationsformel
 - interpolatorische/Newton-Cotes-Formeln, 131
- Interpolation
 - eigenschaft, 99

Index

- polynom, 100
- Konvergenz, 111
- Lagrange-Formel, 100
- iterativer Linearisierungsprozess, 88
- Kondition
 - Addition, 37
 - gut/schlecht konditioniert, 36
 - komponentenweise, 44
 - Matrix, 40
 - normweise, absolut, 36
 - normweise. relativ, 36
- Kontraktion, 80
- Konvergenz
 - global, 84
 - linear, 83
 - lokal, 84
 - Ordnung, 83, 85
 - quadratisch, 83
 - superlinear, 83
- längenerhaltend, 65
- Lagrange-Polynome, 100
- Landau-Symbole, 18
- Legendre-Polynom, 111
- Lemma von Aitken, 101, 107
- LR-Zerlegung, 19
- Mantisse, 30
- Maximum-Likelihood-Methode, 61
- Mehrschrittverfahren, 91
- Moment, 143
- Nachiteration, 56
- Neumannsche Reihe, 41
- Neville-Schema, 102
- Newton-Cotes-Formeln
 - wiederholt, 136
- Newton-Polynome, 103
- Newton-Verfahren, 85
 - Korrekturschritt, 92
 - mehrdimensional, 91
 - Newton-Korrektur, 92
 - vereinfacht, 96
- Norm, 34, 110
 - Euklidische Norm, 35, 111
 - Frobeniusnorm, 35
 - Hölder-Norm, 35
 - Matrixnorm, 35
 - Maximumsnorm, 35
 - Spaltensummennorm, 36
 - submultiplikative, 35
 - Summennorm, 35
 - verträglich, 35
- normalisierte Gleitkommazahl, 30
- normweise Kondition, 36
- Nullstellenbestimmung, 77
- Numerische Quadratur, 129
- orthogonale Projektion, 62
- Orthogonalisierung, 66
- p-Norm, 35
- Peano-Kern, 134
- Permutationsmatrix, 24
- Pivotelement, 16
- Pivotisierung, 22
 - halbmaximale, 22
 - partielle, 22
 - Spalten-, 22
 - vollständige, 23
 - Zeilen-, 23
- Polynomraum, 100
 - Newtonsche Darstellung, 104
- Problem, 34
- Projektionssatz, 62
- Quadraturformel
 - abgeschlossen, 132
 - Ordnung, 136
- Rückwärtsanalyse, 50
- Rückwärtssubstitution, 15
- Realisierung, 48
- Rechenaufwand, 17, 18
- Restglieddarstellung, 109
- Romberg-Folge, 139
- Rundungsfehler, 29
- scharf, 38

Sekantenverfahren, 89
Simpsonregel, 137
Singulärwert, 36
Skalarprodukt, 143
Skalierung
 Spalten-, 55
 Zeilen-, 55
spd Matrix, 56
Spline, 113
 B-Splines, 116
 kubisch, 114
 linear, 114
Splinaumbasis, 114
 $S_{1,\Delta}$ -Basis, 115
 $S_{2,\Delta}$ -Basis, 115
Stützstelle, 99
Stützwert, 99
Stabilität, 50
strikt diagonal dominant, 52

Tangentenverfahren, 86
Toleranz, 95
Trapezregel, 131
Tschebyscheff-Polynom, 110
Tschebyscheff-Punkte, 110

unipotent, 58

Vektoriteration, 149
Verfahren von Crout, 21
Vorwärtselimination, 13, 26
Vorwärtssubstitution, 13, 15, 17

Zahlendarstellung, 29
Zeilensummennorm, 36

Literatur

- [Boo01] Carl de Boor. A Practical Guide to Splines. Applied Mathematical Sciences. Springer New York, 2001. ISBN: 9780387953663.
- [DH08] Peter Deuffhard und Andreas Hohmann. Numerische Mathematik. 1. 4. Aufl. de Gruyter Lehrbuch. Eine algorithmisch orientierte Einführung. Walter de Gruyter & Co., Berlin, 2008. ISBN: 978-3-11-020354-7.
- [DR08] Wolfgang Dahmen und Arnold Reusken. Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler. 2. Aufl. Springer-Lehrbuch. Springer-Verlag, Berlin, 2008. ISBN: 978-3-540-76493-9.
- [FH07] R.W. Freund und R.H.W. Hoppe. Stoer/Bulirsch: Numerische Mathematik 1. Springer-Lehrbuch Bd. 1. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007. ISBN: 9783540453901. URL: <https://books.google.de/books?id=2aYfBAAAQBAJ>.
- [GO96] Gene Golub und James M. Ortega. Scientific computing. Eine Einführung in das wissenschaftliche Rechnen und Parallele Numerik, Übersetzung des englischsprachigen Originals von 1993. B. G. Teubner, Stuttgart, 1996. ISBN: 3-519-02969-3. DOI: 10.1007/978-3-322-82981-8.
- [HH94] Günther Hämmerlin und Karl-Heinz Hoffmann. Numerische Mathematik. 4. Aufl. Springer-Lehrbuch. Grundwissen Mathematik. Springer-Verlag, Berlin, 1994. ISBN: 3-540-58033-6. DOI: 10.1007/978-3-642-57894-6.
- [Pre+02] William H. Press u. a. Numerical recipes in C++. The art of scientific computing, Second edition, updated for C++. Cambridge University Press, Cambridge, 2002. ISBN: 0-521-75033-4.
- [SB90] Josef Stoer und Roland Bulirsch. Numerische Mathematik. 2. 3. Aufl. Springer-Lehrbuch. Eine Einführung—unter Berücksichtigung von Vorlesungen von F. L. Bauer. Springer-Verlag, Berlin, 1990. ISBN: 3-540-51482-1. DOI: 10.1007/978-3-662-22250-8.
- [SW05] Robert Schaback und Holger Wendland. Numerische Mathematik. Springer-Lehrbuch. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2005. ISBN: 9783540267058. URL: <https://books.google.de/books?id=wdgmBAAAQBAJ>.