Institut für Informatik
Dr. Martin Buchholz
Benjamin Peherstorfer

Technische Universität München
WS 2010/2011

# Einführung in die wissenschaftliche Programmierung

Übungsblatt 12

## 1.) LR Zerlegung

Oft will man ein Lineares Gleichungssystem $Ax = b$ für verschiedene Rechte Seiten $b_0, b_1, \dots$ lösen. Dann bietet es sich an, den Gaußalgorithmus als LR Zerlegung zu interpretieren, d.h. man schreibt die Schritte während der Gaußelimination in einer linken unteren Dreiecksmatrix $L$ mit. Man erhält dann eine Zerlegung von $A$ in eine linke untere Dreiecksmatrix $L$ und eine rechte obere Dreiecksmatrix $R$, z.B.

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 6 & 6 & 3 \\ 9 & 8 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = L \cdot R$$

Will man dann das System $Ax = b$ lösen, so kann zuerst durch Vorwärtssubstitution $Ly = b$ und anschließend durch Rückwärtssubstitution $Rx = y$ bestimmt werden. Beides ist in $\mathcal{O}(n^2)$ Schritten möglich, und damit billiger als der Gaußalgorithmus.

Wandeln Sie den Gaußalgorithmus der Vorlesung so um, dass die LR Zerlegung berechnet wird. Schreiben Sie dann eine Funktion um mit den beiden Matrixen $L$ und $R$ das Gleichungssystem $Ax = b$ zu lösen[1].

## 2.) CG Verfahren

Das CG Verfahren ist eine der beliebtesten iterativen Methoden zum Lösen von Linearen Gleichungssystem $Ax = b$ mit symmetrisch positiv definiter (spd) Matrix $A$. Beim Lösen der Wärmeleitungsgleichung mit Finite Differenzen wie in der Vorlesung entsteht eine spd Matrix.

[1] Sie können zusätzlich noch eine Variante mit Pivotstrategie implementieren.

Ist die Matrix $A$ des Gleichungssystems $Ax = b$ symmetrisch positiv definit, dann entspricht das Lösen des Gleichungssystems dem Minimieren der Quadratischen Form

$$f(x) = \frac{1}{2}\langle Ax, x\rangle - \langle b, x\rangle.$$

Anstatt wie bei der Methode des steilsten Abstiegs (*steepest descent*) in Richtungen der Residuen $r_k$ abzusteigen, wird beim CG Verfahren in Richtung $d_k$ gelaufen. Diese Richtung $d_k$ sind $A$-konjugiert, d.h. bzgl. des durch $A$ induzierten Skalarprodukts orthogonal

$$\langle Ad_i, d_j\rangle = 0, \qquad \forall i \neq j.$$

Ohne erstmal auf weitere Details einzugehen[2], ergibt sich der Algorithmus

i) Wähle Startwert $x_0$ und setze $r_0 = b - Ax_0$, $d_0 = r_0$

ii) While $k < N$ und $\|r_k\| > \epsilon$

   (a) Berechne Schrittweite

   $$\alpha_k = \frac{d_k^T r_k}{d_k^T A d_k}$$

   (b) Berechne neuen Ort $x_{k+1}$

   $$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$$

   (c) Update Residuum

   $$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k$$

   (d) Bestimme neue Suchrichtung

   $$\beta_k = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k}$$

   $$d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k d_k$$

Implementieren Sie das CG Verfahren und Lösen Sie damit die Wärmeleitungsgleichung wie in der Vorlesung besprochen.

[2] Sollten Sie CG noch nicht kennen bzw. an weiteren Details interessiert sein, so bietet `http://www.cs.cmu.edu/ quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf` eine gute Einführung.