

10. Übungsblatt zur Numerischen Mathematik für Informatiker und Bioinformatiker

Programmierprojekt 1 (Lineare Gleichungssysteme) :

Implementieren Sie das Gaußsche Eliminationsverfahren mit Spaltenpivotwahl, indem Sie folgende Teilaufgaben lösen:

- (1) LR-Zerlegung (zunächst ohne, dann mit Spaltenpivotwahl),
- (2) Vorwärtssubstitution: $Lc = b \in \mathbb{R}^n$ mit unterer (unipotenter) Dreiecksmatrix L (Aufgabe 1),
- (3) Rückwärtssubstitution: $Rx = c \in \mathbb{R}^n$ mit oberer Dreiecksmatrix R .

Das Programm soll die folgenden Eigenschaften haben:

- a) Falls die Matrix A singulär ist, so bricht das Programm mit einer entsprechenden Fehlermeldung ab.
- b) Die Speicherung der Matrizen L und R erfolgt im Array der Matrix A , indem die Elemente von A geeignet überschrieben werden.
- c) Die Zeilenvertauschungen, welche durch die Spaltenpivotsuche generiert werden, sind durch einem n -dimensionalen Vektor repräsentiert.
- d) Für Bandmatrizen und Matrizen mit Hessenberg-Struktur werden keine unnötigen Operationen durchgeführt.
- e) Für symmetrisch positiv definite Matrizen wird die Cholesky-Zerlegung berechnet.
- f) Neben dem Lösungsvektor wird auch der Wert $\rho_n(A)$ berechnet und ausgegeben. (siehe Definition in der Vorlesung)

Studieren Sie die Ideen der *Zeilenäquilibration* und der *Nachiteration* (z.B. Deuffhard, Hohman: Numerische Mathematik 1, Eine algorithmische Einführung, de Gruyter, 2003³, S. 15–17), und modifizieren Sie entsprechend die Spaltenpivotwahl bzw. implementieren Sie eine Nachiteration.

Testen Sie Ihr Programm an verschiedenen Beispielsystemen $Ax = b$, und verifizieren Sie die Angaben der Vorlesung zu $\rho_n(A)$ für Hessenberg-Matrizen und symmetrisch positiv definite Matrizen.

Betrachten Sie insbesondere das Beispiel

$$\begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2\varepsilon & 2\varepsilon \\ 1 & 2\varepsilon & -\varepsilon \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 3 + 3\varepsilon \\ 6\varepsilon \\ 2\varepsilon \end{bmatrix}$$

mit $\varepsilon =$ relative Maschinengenauigkeit. Wie wirkt sich die Zeilenäquilibration auf die Stabilität, auf den Wert von $\rho_n(A)$ aus? Welchen Lösungsvektor erhalten Sie mit und ohne Nachiteration?

Allgemeine Hinweise:

- (1) Abgabe des Programms bis zum 15. 07. 2009;
- (2) Präsentation des Programms und der Ergebnisse in einem Vortrag am 20. bzw. 22. 07. 2009 in der Übungsgruppe;
- (3) Der Quellcode muss leicht nachvollziehbar sein, d.h. er muss übersichtlich und gut kommentiert sein;
- (4) Die Wahl der Programmiersprache ist in Absprache mit dem Tutor zu treffen.