IWR – Universität Heidelberg
Prof. Dr. Guido Kanschat

Abgabe: **19.12.2012**

# Programmierübung Nr. 8
# zur Vorlesung Einführung in die Numerik, Winter 2012/13

In dieser Woche vergleichen wir die numerischen Qualitäten verschiedener Orthogonalisierungsmethoden. Sei dazu $n = 7$. Gegeben sei ferner die Basis $\{x_1, \ldots, x_n\}$ durch die ersten $n$ Spalten der Hilbertmatrix der Dimension $n$. Benutzen Sie dazu die Hilbertmatrix aus Octave, nicht aus dem Skript.

Berechnen Sie eine Orthonormalbasis $\{q_1, \ldots, q_n\}$ mit den unten aufgeführten Algorithmen. Überprüfen Sie danach die Orthogonalitätsrelation der Vektoren oder berechnen Sie die Spektralkonditionszahl der Matrix $Q = (q_1, \ldots, q_n)$, um die Qualität Ihrer Orthogonalisierung zu testen.

**(a)** Gram-Schmidt-Verfahren (einfache Version)

$r_{11} := \|x_1\|_2$
$q_1 := x_1/r_{11}$
**for** $j := 2 \ldots n$ **do**
  **for** $i := 1 \ldots j-1$ **do**
    $r_{ij} := \langle x_j, q_i \rangle$
  **end for**
  $\hat{q}_j := x_j - \sum_{i=1}^{j-1} r_{ij} q_i$
  $r_{jj} := \|\hat{q}_j\|_2$
  $q_j := \hat{q}_j / r_{jj}$
**end for**

**(b)** Gram-Schmidt-Verfahren (verbesserte Version)

$r_{11} := \|x_1\|_2$
$q_1 := x_1/r_{11}$
**for** $j := 2 \ldots n$ **do**
  $\hat{q}_j = x_j$
  **for** $i := 1 \ldots j-1$ **do**
    $r_{ij} := \langle \hat{q}_j, q_i \rangle$
    $\hat{q}_j := \hat{q}_j - r_{ij} q_i$
  **end for**
  $r_{jj} := \|\hat{q}_j\|_2$
  $q_j := \hat{q}_j / r_{jj}$
**end for**

**(c)** Gram-Schmidt-Verfahren mit Reorthogonalisierung: wenden Sie das verbesserte Gram-Schmidt-Verfahren ein weiteres Mal auf die Vektoren $q_1, \ldots, q_n$ an.

**(d)** (Zusatzaufgabe) Householder-Transformation: Es gelten die Definitionen $P_k = I - 2 w_k w_k^T$ und $e_k = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^T$ mit der "1" in position $k$. Ferner sei $x_{ik}$ die $i$-te Komponente des Vektors $x_k$.

**for** $j := 1 \ldots n$ **do**
  $\beta = \operatorname{sgn}(x_{jj}) \sqrt{\sum_{i=j}^{n} |a_{ij}|^2}$
  $$z = \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix} \text{ mit } z_i = \begin{cases} 0 & i < j \\ \beta + x_{jj} & i = j \\ x_{ij} & i > j \end{cases}$$
  $w_j = z/\|z\|_2$
  $q_j = P_1 P_2 \ldots P_j e_j$
**end for**

Dieses Verfahren ist aus "Y. Saad: Iterative Methods for Sparse Linear Systems, 2nd edition", Abschnitt 1.7, kompiliert. Es muß noch auf Fehler untersucht werden.