Karlsruher Institut für Technologie
IAM Institut für Angewandte Materialien

3 Übung, 6.06.2019
Programmelemente (Unterroutinen, Funktionen, Module), Felder und ihre Anwendung in einem Gleichungssystem

1 Wiederholung des Vorlesungsstoffs

1.1 Programmstruktur

Ein Programm wird in der Regel möglichst strukturiert aufgebaut. Dazu gibt es in Fortran95 folgende Stukturierungselemente:

Hauptprogramm: wird durch das Schlüsselwort `program NameDesProgramms` eingeleitet und durch `End Program NameDesProgramms` abgeschlossen.

Module:

Unterroutinen:

Funktionen:

- Welche Teile eines Programms können in den obigen Strukturierungselementen jeweils verwendet werden:

- Wo steht die Anweisung `implicit none` und was wird durch diese bewirkt?
- Was bedeutet `contains` ?
- Wo steht die `use NameModul` Anweisung und was ist deren Bedeutung?
- Was wird durch das Attribut `extern` erlaubt?
- Welche Möglichkeiten werden durch die `interface` Konstruktion zur Verfügung gestellt?

1.2 Felder, Feldzugriffe

1. Welcher der folgenden Programmzeilen ist sinnvoll? Was bewirken sie, bzw. wo liegt das Problem?

```
    double precision, dimension(-3) :: feld_a
    double precision, dimension(-3:3) :: feld_b
    double precision, dimension(2:10,5) :: feld_c
```

2. Was ist der Inhalt des Variablen A? Schreiben Sie hierzu ein kurzes Programm.

```
    integer :: i,j
    real*8, dimension(1:3,1:3) :: A

    A=reshape( (/ ((i*(j+2),i=1,3), j=1,3) /),(/3,3/))
    print *,A
```

   Ersetzen sie die Zuweisung `A=...` durch do-Schleifen.

2 Löser für ein tridiagonales Gleichungssystem

2.1 Überblick

(siehe auch Vorlesungsfolien)
Ziel ist es, das Gleichungssystem

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{d} \tag{1}$$

zu lösen, wobei die Matrix $\boldsymbol{A}$ nur aus den Elementen auf der Hauptdiagonalen a_i, sowie auf den Elementen unmittelbar unter- und oberhalb (die Elemente c_i und b_i) davon besteht. Es gibt also drei Diagonalen, die von Null verschiedene Elemente haben (deshalb der Name *Tri*diagonal. Eine 3×3 - Matrix sieht dann so aus

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_1 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_2 & b_3 \end{bmatrix}. \tag{2}$$

Die Hauptidee ist, dass eine Matrix $\boldsymbol{A}$ als Produkt zweier Matrizen

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U} \tag{3}$$

geschrieben werden kann. Dabei bezeichnet $\boldsymbol{L}$ die untere Dreiecksmatrix und $\boldsymbol{U}$ die obere Dreiecksmatrix -Matrizen, die jeweils nur unten, bzw. oben von Null verschieden Einträge aufweisen. Das Gleichungssystem (1) kann dann geschrieben werden als

$$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{d}. \tag{4}$$

Danach wird zuerst

$$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{y} = \boldsymbol{d} \tag{5}$$

durch *Substitution* gelöst (was jetzt sehr einfach ist, da ja $\boldsymbol{L}$ Dreiecksform hat), und danach analog

$$\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}, \tag{6}$$

wobei $\boldsymbol{y}$ ein Vektor ist, der nur als Zwischenergebnis aus (5) hervorgeht.

2.2 LU-Zerlegung einer tridiagonalen Matrix

Für 3×3 Matrizen kann $\boldsymbol{L}$ und $\boldsymbol{U}$ so aussehen

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_1 & 1 & 0 \\ 0 & l_2 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} m_1 & r_1 & 0 \\ 0 & m_2 & r_2 \\ 0 & 0 & m_3 \end{bmatrix}, \tag{7}$$

dabei ist man frei in der Wahl, welche der beiden Matrizen Einsen auf der Hauptdiagonalen hat. Die Dekomposition (3) nimmt damit explizit folgende Form an

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 \\ a_1 & b_2 & c_2 \\ 0 & a_2 & b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_1 & 1 & 0 \\ 0 & l_2 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} m_1 & r_1 & 0 \\ 0 & m_2 & r_2 \\ 0 & 0 & m_3 \end{bmatrix}. \tag{8}$$

Im Folgenden werden wir nun die Zeilen dieses Gleichungssystems aufschreiben und nach den unbekannten Größen l_i, m_i und r_i auflösen.

$$b_1 = m_1 \quad \rightarrow \quad m_1 = b_1 \; \Big\} \text{ für } 1 \times 1\text{- Matrix} \tag{9}$$

$$\left.\begin{aligned} c_1 &= r_1 & &\rightarrow & r_1 &= c_1 \\ a_1 &= l_1 m_1 & &\rightarrow & l_1 &= \tfrac{a_1}{m_1} \\ b_2 &= l_1 r_1 + m_2 & &\rightarrow & m_2 &= b_2 - l_1 r_1 \end{aligned}\right\} \text{zusätzlich für } 2 \times 2\text{- Matrix} \tag{10}$$

$$\left.\begin{aligned} c_2 &= r_2 & &\rightarrow & r_2 &= c_2 \\ a_2 &= l_2 m_2 & &\rightarrow & l_2 &= \tfrac{a_2}{m_2} \\ b_3 &= l_2 r_2 + m_3 & &\rightarrow & m_3 &= b_3 - l_2 r_2 \end{aligned}\right\} \text{zusätzlich für } 3 \times 3\text{- Matrix} \tag{11}$$

Man kann leicht erkennen, dass m_1 ein Sonderfall ist, während die Gleichungen für r_1, l_1 und m_2 sich mit um eins erhöhtem Index wiederholen.

Der Algorithmus kann nun folgendermaßen für den allgemeinen Fall einer $n \times n$-Matrix zusammengefasst werden:

① Setze $m_1 := b_1$

② Zähle i von $1, ..., (n-1)$ hoch und setze dabei

$$r_i := c_i, \quad l_i := \frac{a_i}{m_i}, \quad \text{sowie} \quad m_{i+1} := b_{i+1} - l_i r_i$$

Die l_i ergeben nun die untere Dreiecksmatrix, die m_i zusammen mit den r_i ergeben die obere Dreiecksmatrix, vgl. (7), z.B. für eine 3×3-Matrix

2.3 Lösen von $\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{y} = \boldsymbol{d}$ durch Forwärts-Substitution

Schreibt man das Gleichungssystem (5) explizit auf, so kann man durch einfaches Einsetzen und Auflösen die Lösung $\boldsymbol{y}$ erhalten

$$y_1 = d_1, \quad y_2 = d_2 - l_1 y_1, \quad y_3 = d_3 - l_2 y_2, \tag{12}$$

was gleichzeitig den Algorithmus definiert

① Setze $y_1 := d_1$

② Zähle i von $2, ..., (n)$ hoch und setze dabei

$$y_i = d_i - l_{i-1} y_{i-1} \tag{13}$$

2.4 Lösen von $\boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ durch Rückwärts-Substitution

Analog (nur von unten nach oben) folgt für $\boldsymbol{x}$ unter Berücksichtigung, dass die Hauptdiagonale jetzt nicht nur Einsen enthält

$$x_3 = \frac{y_3}{m_3}, \quad x_2 = \frac{y_2 - x_3 r_2}{m_2}, \quad x_1 = \frac{y_1 - x_2 r_1}{m_1}, \tag{14}$$

und es ergibt sich folgender Algorithmus:

① Setze $x_n := \frac{y_n}{m_n}$

② Zähle i von $(n-1), ..., 1$ runter und setze dabei

$$x_i = \frac{y_i - x_{i+1} r_i}{m_i} \tag{15}$$

Die x_i sind die gesuchte Lösung des linearen Gleichungssystems (1).

2.5 Aufgaben:

1. Machen Sie sich die Arbeitsweise des gesamten Algorithmus' anhand folgenden Beispiels klar. Gegeben ist das Gleichungssystem

$$6x_1 - 2x_2 = 14 \tag{16}$$
$$9x_1 - x_2 + x_3 = 21 \tag{17}$$
$$-7x_2 + 5x_3 = 17. \tag{18}$$

   Schreiben Sie das Gleichungssystem um in Matrizen-/Vektoren-Form und wenden Sie den LU-Zerlegungsalgorithmus an. Lösen Sie das Gleichnungssystem (4) anschließend durch die zwei Substitutionsschritte.

2. Schreiben Sie eine `subroutine`, die die LU-Zerlegung einer Matrix allgemeiner Dimension durchführt

3. Schreiben sie je eine `subroutine`, die das Vorwärts- bzw. Rückwärtssubstituieren durchführt.

4. Überprüfen Sie Ihr Programm anhand des von Hand gerechneten Beispiels.

5. Verwenden Sie für den LU-Algorithmus nun ein Modul und binden Sie dieses in Ihre Hauptprogramm ein.
   Was müssen Sie beim Übersetzen beachten?

6. Lösen sie nun das eindimensionale Wärmeleitproblem (siehe Vorlesung) mit Hilfe ihres Moduls (LU-Algorithmus). Verwenden Sie die Parameter und Randbedingungen aus den Vorlesungsfolien und vergleichen Sie die Lösungen.