Heidelberger Numerikbibliothek für die Lehre

Peter Bastian

Universität Heidelberg
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen
Im Neuenheimer Feld 205, D-69120 Heidelberg
email: Peter.Bastian@iwr.uni-heidelberg.de

18. Februar 2022

Inhalt

Was ist HDNUM

- HDNUM ist eine kleine Sammlung von C++ Klassen, die die Implementierung numerischer Algorithmen aus der Vorlesung erleichtern soll.
- Die aktuelle Version gibt es unter

`http://conan.iwr.uni-heidelberg.de/teaching/numerik1_ws2011/`

- Einige Ziele bei der Entwicklung von HDNUM waren:
  - Einfache Installation: Es mur nur eine Header-Datei eingebunden werden.
  - Einfache Benutzung der Klassen: Z.B. keine dynamische Speicherverwaltung.
  - Möglichkeit der Rechnung mit verschiedenen Zahl-Datentypen.
  - Effiziente Realisierung der Verfahren möglich: Z.B. Block-Algorithmen in der linearen Algebra.

Installation

- Datei `hdnum-x.yy.tgz` (komprimiertes tar archive) herunterladen.
- Archiv mit `tar zxf hdnum-x.yy.tgz` entpacken.
- Das Verzeichnis enthält unter anderem:
  - Das Verzeichnis `src` mit dem Quellcode der Klassen (muss Sie nicht interessieren).
  - Das Verzeichnis `examples` mit den Beispielanwendungen (die sollten Sie sich ansehen).
  - Das Verzeichnis `tutorial`: Quelle für dieses Dokument.
  - Die Datei `hdnum.hh`, die zentrale Header-Datei, die in alle Anwendungen eingebunden werden muss.
- Das Verzeichnis `hdnum/examples/num0` enthält ein simples Makefile zum übersetzen der Programme.
- Die Beispiele erfordern die Installation der GNU multiprecision library `http://gmplib.org/`. Ist diese nicht vorhanden müssen Makefiles entsprechend angepasst werden.

Typisches HDNUM Programm

```
1  // hallohdnum.cc
2  #include <iostream>     // notwendig zur Ausgabe
3  #include <vector>
4  #include "hdnum.hh"     // hdnum header
5
6  int main ()
7  {
8    std::cout << "Numerik␣0␣ist␣ganz␣leicht!" << std::endl;
9    std::cout << "1+1=" << 1+1 << std::endl;
10
11   return 0;
12 }
```

- übersetzen im Verzeichnis `examples/num0` mit GMP installiert:

  `g++ -I.. -o hallohdnum hallohdnum.cc -lm -lgmpxx -lgmp`
- und ohne GMP:

  `g++ -I.. -o hallohdnum hallohdnum.cc -lm`
- oder einfach

  `make`
- oder falls kein GMP installiert ist

Programmierumgebung

- Wir benutzen die Programmiersprache C++.
- Wir behandeln nur die Programmierung unter LINUX mit den GNU compilern.
- Windows: On your own.
- Wir setzen Grundfertigkeit im Umgang mit LINUX-Rechnern voraus:
  - Shell, Kommandozeile, Starten von Programmen.
  - Dateien, Navigieren im Dateisystem.
  - Erstellen von Textdatein mit einem Editor ihrer Wahl.
- Idee des Kurses: „Lernen an Beispielen“, keine rigorose Darstellung.
- Blutige Anfänger sollten zusätzlich ein Buch lesen.

Workflow

C++ ist eine „kompilierte“ Sprache. Um ein Programm zur Ausführung zu bringen sind folgende Schritte notwendig:

1. Erstelle/Ändere den Programmtext mit einem **Editor**.
2. Übersetze den Programmtext mit dem **C++-Übersetzer** (auch C++-Compiler) in ein Maschinenprogramm.
3. Führe das Programm aus. Das Programm gibt sein Ergebnis auf dem Bildschirm oder in eine Datei aus.
4. Interpretiere Ergebnisse. Dazu benutzen wir weitere Programme wie **gnuplot** oder **grep**.
5. Falls Ergebnis nicht korrekt, gehe nach 1!

HDNUM

- C++ kennt keine Matrizen, Vektoren, Polynome, ...
- Wir haben C++ erweitert um die **Heidelberg Educational Numerics Library**, kurz **HDNum**.
- Alle in der Vorlesung behandelten Beispiele sind dort enthalten.
- Dieser Programmierkurs ist auch Teil von HDNUM

Herunterladen von HDNUM

1. Einloggen
2. Herunterladen von HDNUM

```
git clone https://parcomp-git.iwr.uni-heidelberg.de/Teaching/hdnum.git
```

3. Wechsle in das Verzeichnis

```
$ cd hdnum/examples/progkurs
```

4. Anzeigen der Dateien mittels

```
$ ls
```

Wichtige UNIX-Befehle

- `ls --color -F` - Zeige Inhalt des aktuellen Verzeichnisses
- `cd` - Wechsle ins Home-Verzeichnis
- `cd <verzeichnis>` - Wechsle in das angegebene Verzeichnis (im aktuellen Verzeichnis)
- `cd ..` - Gehe aus aktuellem Verzeichnis heraus
- `mkdir < verzeichnis>` - Erstelle neues Verzeichnis
- `cp <datei1> <datei2>` - Kopiere datei1 auf datei2 (datei2 kann durch Verzeichnis ersetzt werden)
- `mv <datei1> <datei2>` - Benenne datei1 in datei2 um (datei2 kann durch Verzeichnis ersetzt werden, dann wird datei1 dorthin verschoben)
- `rm <datei>` - Lösche datei
- `rm -rf <verzeichnis>` - Lösche Verzeichnis mit allem darin

Hallo Welt !

Öffne die Datei `hallohdnum.cc` mit einem Editor:

```
$ gedit hallohdnum.cc
```

```
1  // hallohdnum.cc
2  #include <iostream>     // notwendig zur Ausgabe
3  #include <vector>
4  #include "hdnum.hh"     // hdnum header
5
6  int main ()
7  {
8    std::cout << "Numerik␣0␣ist␣ganz␣leicht!" << std::endl;
9    std::cout << "1+1=" << 1+1 << std::endl;
10
11   return 0;
12 }
```

- `iostream` ist eine sog. „Headerdatei“
- `#include` erweitert die „Basissprache“.
- `int main ()` braucht man immer: „Hier geht's los“.
- `{ ... }` klammert Folge von Anweisungen.
- Anweisungen werden durch Semikolon abgeschlossen

Hallo Welt laufen lassen

- Gebe folgende Befehle ein:

```
$ g++ -I../../ -o hallohdnum hallohdnum.cc
$ ./hallohdnum
```

- Dies sollte dann die folgende Ausgabe liefern:

```
Numerik 0 ist ganz leicht!
1+1=2
```

(Zahl-) Variablen

- Aus der Mathematik: „$x \in M$“. Variable x nimmt einen beliebigen Wert aus der Menge M an.
- Geht in C++ mit: `M x;`
- **Variablendefinition**: `x` ist eine Variable vom **Typ** `M`.
- Mit **Initialisierung**: `M x(0);`
- Wert von Variablen der „eingebauten“ Typen ist sonst nicht definiert.

```
1  // zahlen.cc
2  #include <iostream>
3
4  int main ()
5  {
6    unsigned int i; // uninitialisierte natuerliche Zahl
7    double x(3.14); // initialisierte Fliessommazahl
8    float y(1.0);   // einfache Genauigkeit
9    short j(3);     // eine 'kleine' Zahl
10   std::cout << "(i+x)*(y+j)=" << (i+x)*(y+j) << std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

Andere Typen

- C++ kennt noch viele weitere Typen.
- Typen können nicht nur Zahlen sondern viele andere Informationen repräsentieren.
- Etwa Zeichenketten: `std::string`
- Oft muss man dazu weitere Headerdateien angeben.

```
1  // string.cc
2  #include <iostream>
3  #include <string>
4
5  int main ()
6  {
7    std::string m1("Zeichen");
8    std::string leer("␣␣␣");
9    std::string m2("kette");
10   std::cout << m1+leer+m2 << std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

- Jede Variable *muss* einen Typ haben. Strenge Typbindung.

Mehr Zahlen

```
1  // mehrzahlen.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <complex>  // header für komplexe Zahlen
4
5  int main ()
6  {
7    std::complex<double> y(1.0,3.0);
8    std::cout << y << std::endl;
9
10   return 0;
11 }
```

- GNU Multiprecision Library `http://gmplib.org/` erlaubt Zahlen mit vielen Stellen (hier 512 Stellen zur Basis 2).
- übersetzen mit:

  ```
  $ g++ -I../../ -o mehrzahlen mehrzahlen.cc -lgmpxx -lgmp
  ```
- Komplexe Zahlen sind Paare von Zahlen.
- `complex<>` ist ein Template: Baue komplexe Zahlen aus jedem anderen Zahlentyp auf (später mehr!).

Mehr Ein- und Ausgabe

```
1  // eingabe.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <iomanip>  // für setprecision
4  #include <cmath>    // für sqrt
5
6  int main ()
7  {
8    double x(0.0);
9    std::cout << "Gebe␣eine␣Zahl␣ein:␣";
10   std::cin >> x;
11   std::cout << "Wurzel(x)=␣"
12             << std::scientific << std::showpoint
13             << std::setprecision(15)
14             << sqrt(x) << std::endl;
15
16   return 0;
17 }
```

- Eingabe geht mit `std::cin >> x;`
- Standardmäßig werden nur 6 Nachkommastellen ausgegeben. Das ändert man mit `std::setprecision`.
- Dazu muss man die Headerdatei `iomanip` einbinden

Zuweisung

- Den Wert von Variablen kann man ändern. Sonst wäre es langweilig :-)
- Dies geht mittels Zuweisung:

```
double x(3.14); // Variablendefinition mit Initialisierung
double y;       // uninitialisierte Variable
y = x;          // Weise y den Wert von x zu
x = 2.71;       // Weise x den Wert 2.71, y unverändert
y = (y*3)+4;    // Werte Ausdruck rechts von = aus
                // und weise das Resultat y zu!
```

Blöcke

- Block: Sequenz von Variablendefinitionen und Zuweisungen in geschweiften Klammern.

```
{
  double x(3.14);
  double y;
  y = x;
}
```

- Blöcke können rekursiv geschachtelt werden.
- Eine Variable ist nur in dem Block *sichtbar* in dem sie definiert ist sowie in allen darin enthaltenen Blöcken:

```
{
  double x(3.14);
  {
    double y;
    y = x;
  }
  y = (y*3)+4; // geht nicht, y nicht mehr sichtbar.
}
```

Whitespace

- Das Einrücken von Zeilen dient der besseren Lesbarkeit, notwendig ist es (fast) nicht.
- `#include`-Direktiven müssen *immer* einzeln auf einer Zeile stehen.
- Ist das folgende Programm lesbar?

```
1  // whitespace.cc
2  #include <iostream> // includes auf eigener Zeile!
3  #include <iomanip>
4  #include <cmath>
5
6  int main(){
7    double x(0.0);
8    std::cout<<"Gebe␣eine␣lange␣Zahl␣ein:␣";std::cin >> x;
9    std::cout<<"Wurzel(x)=␣"<<std::scientific<<std::showpoint
10             <<std::setprecision(16)<<sqrt(x)<< std::endl;
11
12   return 0;
13 }
```

If-Anweisung

- Aus der Mathematik kennt man eine „Zuweisung“ der folgenden Art.
  Für $x \in \mathbb{R}$ setze

$$y = |x| = \begin{cases} x & \text{falls } x \geq 0 \\ -x & \textit{sonst} \end{cases}$$

- Dies realisiert man in C++ mit einer `If`-Anweisung:

```
double x(3.14), y;
if (x>=0)
{
  y = x;
}
else
{
  y = -x;
}
```

Varianten der If-Anweisung

- Die geschweiften Klammern kann man weglassen, wenn der Block nur eine Anweisung enthält:

```
double x(3.14), y;
if (x>=0) y = x; else y = -x;
```

- Der else-Teil ist optional:

```
double x=3.14;
if (x<0)
  std::cout << "x␣ist␣negativ!" << std::endl;
```

- Weitere Vergleichsoperatoren sind < <= == >= > !=
- Beachte: = für Zuweisung, aber == für den Vergleich zweier Objekte!

While-Schleife

- Bisher: Sequentielle Abfolge von Befehlen wie im Programm angegeben. Das ist langweilig :-)
- Eine Möglichkeit zur Wiederholung bietet die `While`-Schleife:
  `while` (*Bedingung*)
  { *Schleifenkörper* }
- Beispiel:

```
int i=0; while (i<10) { i=i+1; }
```

- Bedeutung:
  1. Teste Bedingung der `While`-Schleife
  2. Ist diese *wahr* dann führe Anweisungen im Schleifenkörper aus, sonst gehe zur ersten Anweisung nach dem Schleifenkörper.
  3. Gehe nach 1.
- Anweisungen im Schleifenkörper beeinflussen normalerweise den Wahrheitswert der Bedingung.
- Endlosschleife: Wert der Bedingung wird nie *falsch*.

Pendel (analytische Lösung; `while`-Schleife)

- Die Auslenkung des Pendels mit der Näherung $\sin(\phi) \approx \phi$ und $\phi(0) = \phi_0$, $\phi'(0) = 0$ lautet:

$$\phi(t) = \phi_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{l}}t\right).$$

- Das folgende Programm gibt diese Lösung zu den Zeiten $t_i = i\Delta t$, $0 \leq t_i \leq T$, $i \in \mathbb{N}_0$ aus:

Pendel (analytische Lösung, while-Schleife)

```
1  // pendelwhile.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4  int main ()
5  {
6    double l(1.34);   // Pendellänge in Meter
7    double phi0(0.2); // Amplitude im Bogenmaß
8    double dt(0.05);  // Zeitschritt in Sekunden
9    double T(30.0);   // Ende in Sekunden
10   double t(0.0);    // Anfangswert
11
12   while ( t<=T )
13   {
14     std::cout << t << "␣"
15               << phi0*cos(sqrt(9.81/l)*t)
16               << std::endl;
17     t = t + dt;
18   }
19
20   return 0;
21 }
```

Wiederholung (for-Schleife)

- Möglichkeit der Wiederholung: `for`-Schleife:
  `for` (*Anfang*; *Bedingung*; *Inkrement*)
  { *Schleifenkörper* }
- Beispiel:

```
for (int i=0; i<=5; i=i+1)
{
  std::cout << "Wert␣von␣i␣ist␣" << i << std::endl;
}
```

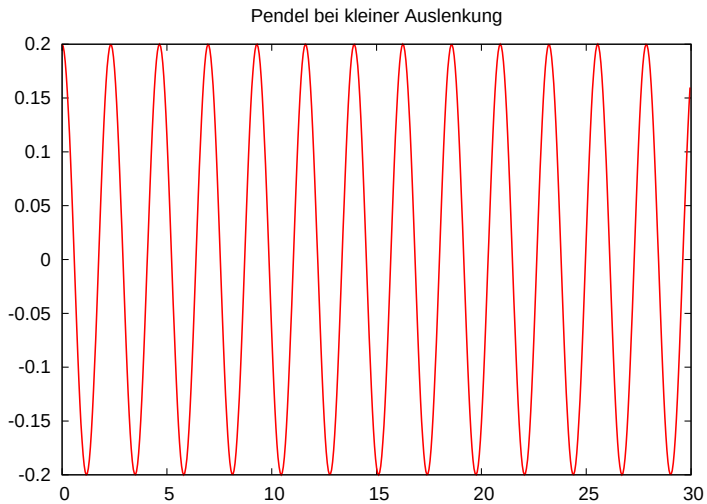
- Enthält der Block nur eine Anweisung dann kann man die geschweiften Klammern weglassen.
- Die *Schleifenvariable* ist so nur innerhalb des Schleifenkörpers sichtbar.
- Die `for`-Schleife kann auch mittels einer *while*-Schleife realisiert werden.

Pendel (analytische Lösung, for-Schleife)

```
1  // pendel.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  int main ()
6  {
7    double l(1.34);   // Pendellänge in Meter
8    double phi0(0.2); // Amplitude im Bogenmaß
9    double dt(0.05);  // Zeitschritt in Sekunden
10   double T(30.0);   // Ende in Sekunden
11   for (double t=0.0; t<=T; t=t+dt)
12   {
13     std::cout << t << "␣"
14               << phi0*cos(sqrt(9.81/l)*t)
15               << std::endl;
16   }
17
18   return 0;
19 }
```

Visualisierung mit Gnuplot

- `Gnuplot` erlaubt einfache Visualisierung von Funktionen $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ und $g : \mathbb{R} \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$.
- Für $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ genügt eine zeilenweise Ausgabe von Argument und Funktionswert.
- Umlenken der Ausgabe eines Programmes in eine Datei:
  `$ ./pendel > pendel.dat`
- Starte `gnuplot`
  `gnuplot> plot "pendel.dat"with lines`



Geschachtelte Schleifen

- Ein Schleifenkörper kann selbst wieder eine Schleife enthalten, man spricht von *geschachtelten* Schleifen.
- Beispiel:

```
for (int i=1; i<=10; i=i+1)
  for (int j=1; j<=10; j=j+1)
    if (i==j)
      std::cout << "i gleich j: " << std::endl;
    else
      std::cout << "i ungleich j!" << std::endl;
```

Numerische Lösung des Pendels

- Volles Modell für das Pendel aus der Einführung:

$$\frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = -\frac{g}{l}\sin(\phi(t)) \qquad \forall t > 0,$$

$$\phi(0) = \phi_0, \qquad \frac{d\phi}{dt}(0) = u_0.$$

- Umschreiben in System erster Ordnung:

$$\frac{d\phi(t)}{dt} = u(t), \qquad \frac{d^2\phi(t)}{dt^2} = \frac{du(t)}{dt} = -\frac{g}{l}\sin(\phi(t)).$$

- Eulerverfahren für $\phi^n = \phi(n\Delta t)$, $u^n = u(n\Delta t)$:

$$\phi^{n+1} = \phi^n + \Delta t\, u^n \qquad \phi^0 = \phi_0$$

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t\,(g/l)\,\sin(\phi^n) \qquad u^0 = u_0$$

Pendel (expliziter Euler)

```
1  // pendelnumerisch.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  int main ()
6  {
7    double l(1.34);   // Pendellänge in Meter
8    double phi(3.0);  // Anfangsamplitude in Bogenmaß
9    double u(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
10   double dt(1E-4);  // Zeitschritt in Sekunden
11   double T(30.0);   // Ende in Sekunden
12   double t(0.0);    // Anfangszeit
13
14   std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
15   while (t<T)
16   {
17     t = t + dt;          // inkrementiere Zeit
18     double phialt(phi);// merke phi
19     double ualt(u);     // merke u
20     phi = phialt + dt*ualt;              // neues phi
21     u = ualt - dt*(9.81/l)*sin(phialt);// neues u
22     std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
23   }
24
```

Funktionsaufruf und Funktionsdefinition

- In der Mathematik gibt es das Konzept der *Funktion*.
- In C++ auch.
- Sei $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, z.B. $f(x) = x^2$.
- Wir unterscheiden den *Funktionsaufruf*

```
double x,y;
y = f(x);
```

- und die *Funktionsdefinition*. Diese sieht so aus:

  Ergebnistyp Funktionsname (*Argumente*)
  { *Funktionsrumpf* }

- Beispiel:

```
double f (double x)
{
  return x*x;
}
```

Komplettbeispiel zur Funktion

```
1  // funktion.cc
2  #include <iostream>
3
4  double f (double x)
5  {
6    return x*x;
7  }
8
9  int main ()
10 {
11   double x(2.0);
12   std::cout << "f(" << x << ")=" << f(x) << std::endl;
13
14   return 0;
15 }
```

- Funktionsdefinition muss vor Funktionsaufruf stehen.
- Formales Argument in der Funktionsdefinition entspricht einer Variablendefinition.
- Beim Funktionsaufruf wird das Argument (hier) *kopiert*.
- `main` ist auch nur eine Funktion.

Weiteres zum Verständnis der Funktion

- Der Name des formalen Arguments in der Funktionsdefinition ändert nichts an der Semantik der Funktion (Sofern es überall geändert wird):

```
double f (double y)
{
  return y*y;
}
```

- Das Argument wird hier kopiert, d.h.:

```
double f (double y)
{
  y = 3*y*y;
  return y;
}

int main ()
{
  double x(3.0),y;
  y = f(x); // ändert nichts an x !
}
```

Weiteres zum Verständnis der Funktion

- Argumentliste kann leer sein (wie in der Funktion `main`):

```
double pi ()
{
  return 3.14;
}

y = pi(); // Klammern sind erforderlich!
```

- Der Rückgabetyp `void` bedeutet „keine Rückgabe“

```
void hello ()
{
  std::cout << "hello" << std::endl;
}

hello();
```

- Mehrere Argument werden durch Kommata getrennt:

```
double g (int i, double x)
{
  return i*x;
}
std::cout << g(2,3.14) << std::endl;
```

Pendelsimulation als Funktion

```
1  // pendelmitfunktion.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  void simuliere_pendel (double l, double phi, double u)
6  {
7    double dt   = 1E-4;
8    double T    = 30.0;
9    double t    = 0.0;
10
11   std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
12   while (t<T)
13   {
14     t = t + dt;
15     double phialt(phi),ualt(u);
16     phi = phialt + dt*ualt;
17     u = ualt - dt*(9.81/l)*sin(phialt);
18     std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
19   }
20 }
21
22 int main ()
23 {
24   simuliere_pendel(1.34,3.0,0.0);
```

Funktionsschablonen

- Oft macht eine Funktion mit Argumenten verschiedenen Typs einen Sinn.
- `double f (double x) {return x*x;}` macht auch mit `float`, `int` oder `mpf_class` Sinn.
- Man könnte die Funktion für jeden Typ definieren. Das ist natürlich sehr umständlich. (Es darf mehrere Funktionen gleichen Namens geben, sog. *overloading*).
- In C++ gibt es mit Funktionsschablonen (engl.: *function templates*) eine Möglichkeit den Typ variabel zu lassen:

```
template<typename T>
T f (T y)
{
  return y*y;
}
```

- `T` steht hier für einen beliebigen Typ.

Pendelsimulation mit Templates I

```
1  // pendelmitfunktionstemplate.cc
2  #include <iostream> // header für Ein-/Ausgabe
3  #include <cmath>    // mathematische Funktionen
4
5  template<typename Number>
6  void simuliere_pendel (Number l, Number phi, Number u)
7  {
8    Number dt(1E-4);
9    Number T(30.0);
10   Number t(0.0);
11   Number g(9.81/l);
12
13   std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
14   while (t<T)
15   {
16     t = t + dt;
17     Number phialt(phi),ualt(u);
18     phi = phialt + dt*ualt;
19     u = ualt - dt*g*sin(phialt);
20     std::cout << t << "␣" << phi << std::endl;
21   }
22 }
```

Pendelsimulation mit Templates II

```
23
24 int main ()
25 {
26   float l1(1.34);   // Pendellänge in Meter
27   float phi1(3.0); // Anfangsamplitude in Bogenmaß
28   float u1(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
29   simuliere_pendel(l1,phi1,u1);
30
31   double l2(1.34);   // Pendellänge in Meter
32   double phi2(3.0); // Anfangsamplitude in Bogenmaß
33   double u2(0.0);    // Anfangsgeschwindigkeit
34   simuliere_pendel(l2,phi2,u2);
35
36   return 0;
37 }
```

Referenzargumente

- Das Kopieren der Argumente einer Funktion kann verhindert werden indem man das Argument als *Referenz* definiert:

```
void f (double x, double& y)
{
  y = x*x;
}

double x(3), y;
f(x,y); // y hat nun den Wert 9, x ist unverändert.
```

- Statt eines Rückgabewertes kann man auch ein (zusätzliches) Argument modifizieren.
- Insbesondere kann man so den Fall mehrerer Rückgabewerte realisieren.
- Referenzargumente bieten sich auch an wenn Argumente „sehr groß“ sind und damit das kopieren sehr zeitaufwendig ist.
- Der aktuelle Parameter im Aufruf *muss* dann eine Variable sein.

Inhalt

hdnum::Vector<T>

- hdnum::Vector<T> ist ein Klassen-Template.
- Es macht aus einem beliebigen (Zahl-)Datentypen T einen Vektor.
- Auch komplexe und hochgenaue Zahlen sind möglich.
- Vektoren verhalten sich so wie man es aus der Mathematik kennt:
  - Bestehen aus n Komponenten.
  - Diese sind von 0 bis $n-1$ (!) durchnummeriert.
  - Addition und Multiplikation mit Skalar.
  - Skalarprodukt und Norm (noch nicht implementiert).
  - Matrix-Vektor-Multiplikation
- Die folgenden Beispiele findet man in `vektoren.cc`

Konstruktion und Zugriff

- Konstruktion mit und ohne Initialisierung

```
hdnum::Vector<float> x(10);          // Vektor mit 10 Ele
hdnum::Vector<double> y(10,3.14);    // 10 Elemente initi
hdnum::Vector<float> a;              // ein leerer Vektor
```

- Speziellere Vektoren

```
hdnum::Vector<std::complex<double> >
  cx(7,std::complex<double>(1.0,3.0));
mpf_set_default_prec(1024); // Setze Genauigkeit für mpf_
hdnum::Vector<mpf_class> mx(7,mpf_class("4.44"));
```

- Zugriff auf Element

```
for (std::size_t i=0; i<x.size(); i=i+1)
  x[i] = i;                          // Zugriff auf Elemente
```

- Vektorobjekt wird am Ende des umgebenden Blockes gelöscht.

Kopie und Zuweisung

- Copy-Konstruktor: Erstellen eines Vektors als Kopie eines anderen

```
hdnum::Vector<float> z(x); // z ist Kopie von x
```

- Zuweisung nach Initialisierung, beide Vektoren müssen die gleiche Größe haben!

```
b = z;                    // b kopiert die Daten aus z
a = 5.4;                  // Zuweisung an alle Elemente
hdnum::Vector<double> w;  // leerer Vektor
w.resize(x.size()); // make correct size
w = x;                    // copy elements
```

- Ausschnitte von Vektoren

```
hdnum::Vector<float> w(x.sub(7,3));// w ist Kopie von x
z = x.sub(3,4);                    // z ist Kopie von x[3],...,x
```

Rechnen und Ausgabe

- Vektorraumoperationen und Skalarprodukt

```
w += z;                 // w = w+z
w -= z;                 // w = w-z
w *= 1.23;              // skalare Multiplikation
w /= 1.23;              // skalare Division
w.update(1.23,z);       // w = w + a*z
float s;
s = w*z;                // Skalarprodukt
```

- Ausgabe auf die Konsole

```
std::cout << w << std::endl;// schöne Ausgabe
w.iwidth(2);                // Stellen in Indexausgabe
w.width(20);                // Anzahl Stellen gesamt
w.precision(16);            // Anzahl Nachkommastellen
std::cout << w << std::endl;// nun mit mehr Stellen
std::cout <<cx << std::endl;// geht auch für complex
std::cout <<mx << std::endl;// geht auch für mpf_class
```

Beispielausgabe

```
[    0]     1.204200e+01
[    1]     1.204200e+01
[    2]     1.204200e+01
[    3]     1.204200e+01

[ 0] 1.20420000770568848e+01
[ 1] 1.20420000770568848e+01
[ 2] 1.20420000770568848e+01
[ 3] 1.20420000770568848e+01
```

Hilfsfunktionen

```
zero(w);                              // das selbe wie w=0.0
fill(w,(float)1.0);                   // das selbe wie w=1.0
fill(w,(float)0.0,(float)0.1);  // w[0]=0, w[1]=0.1, w[2]=0.2,
...
unitvector(w,2);                      // kartesischer Einheitsvektor
gnuplot("test.dat",w);                // gnuplot Ausgabe: i w[i]
gnuplot("test2.dat",w,z);             // gnuplot Ausgabe: w[i] z[i]
```

Funktionen

- Beispiel: Summe aller Komponenten

```
double sum (hdnum::Vector<double> x) {
  double s(0.0);
  for (std::size_t i=0; i<x.size(); i=i+1)
    s = s + x[i];
  return s;
}
```

- Mit **Funktionentemplate**:

```
template<class T>
T sum (hdnum::Vector<T> x) {
  T s(0.0);
  for (std::size_t i=0; i<x.size(); i=i+1)
    s = s + x[i];
  return s;
}
```

- **Vorsicht**: Call-by-value erzeugt **keine** Kopie!

hdnum::DenseMatrix<T>

- hdnum::DenseMatrix<T> ist ein Klassen-Template.
- Es macht aus einem beliebigen (Zahl-)Datentypen T eine Matrix.
- Auch komplexe und hochgenaue Zahlen sind möglich.
- Matrizen verhalten sich so wie man es aus der Mathematik kennt:
  - Bestehen aus $m \times n$ Komponenten.
  - Diese sind von 0 bis $m-1$ bzw. $n-1$ (!) durchnummeriert.
  - $m \times n$-Matrizen bilden einen Vektorraum.
  - Matrix-Vektor und Matrizenmultiplikation.
- Die folgenden Beispiele findet man in matrizen.cc

Konstruktion und Zugriff

- Konstruktion mit und ohne Initialisierung

```
hdnum::DenseMatrix<float> B(10,10);       // 10x10 Matris
uninitialisiert
hdnum::DenseMatrix<float> C(10,10,0.0); // 10x10 Matris
initialisiert
```

- Zugriff auf Elemente

```
for (int i=0; i<B.rowsize(); ++i)
  for (int j=0; j<B.colsize(); ++j)
    B[i][j] = 0.0;                  // jetzt ist B initialisiert
```

- Matrixobjekt wird am Ende des umgebenden Blockes gelöscht.

Kopie und Zuweisung

- Copy-Konstruktor: Erstellen einer Matrix als Kopie einer anderen

```
hdnum::DenseMatrix<float> D(B); // D Kopie von B
```

- Zuweisung nach Initialisierung, beide Matrizen müssen gleiche Größe haben:

```
hdnum::DenseMatrix<float> A(B.rowsize(),B.colsize())
make correct size
A = B;                          // copy elements
```

- Ausschnitte von Matrizen (Untermatrizen)

```
hdnum::DenseMatrix<float> F(A.sub(1,2,3,4)); // 3x4 Ma
ab (1,2)
```

Rechnen mit Matrizen

- Vektorraumoperationen

```
A += B;                 // A = A+B
A -= B;                 // A = A-B
A *= 1.23;              // Multiplikation mit Skalar
A /= 1.23;              // Division durch Skalar
A.update(1.23,B);       // A = A + s*B
```

- Matrix-Vektor und Matrizenmultiplikation

```
hdnum::Vector<float> x(10,1.0);  // make two vectors
hdnum::Vector<float> y(10,2.0);
A.mv(y,x);                       // y = A*x
A.umv(y,x);                      // y = y + A*x
A.umv(y,(float)-1.0,x);          // y = y + s*A*x
C.mm(A,B);                       // C = A*B
C.umm(A,B);                      // C = C + A*B
```

Ausgabe und Hilfsfunktionen

- Ausgabe von Matrizen

```
std::cout << A.sub(0,0,3,3) << std::endl;// schöne Aus
A.iwidth(2);                             // Stellen in Indexausgabe
A.width(10);                             // Anzahl Stellen gesamt
A.precision(4);                          // Anzahl Nachkommastellen
std::cout << A << std::endl;// nun mit mehr Stellen
```

- einige Hilfsfunktionen

```
identity(A);
spd(A);
fill(x,(float)1,(float)1);
vandermonde(A,x);
```

Beispielausgabe

	0	1	2	3
0	4.0000e+00	-1.0000e+00	-2.5000e-01	-1.1111e-01
1	-1.0000e+00	4.0000e+00	-1.0000e+00	-2.5000e-01
2	-2.5000e-01	-1.0000e+00	4.0000e+00	-1.0000e+00
3	-1.1111e-01	-2.5000e-01	-1.0000e+00	4.0000e+00

Funktion mit Matrixargument

Beispiel einer Funktion, die eine Matrix A und einen Vektor b initialisiert.

```
template<class T>
void initialize (hdnum::DenseMatrix<T> A, hdnum::Vector<
{
  if (A.rowsize()!=A.colsize() || A.rowsize()==0)
    HDNUM_ERROR("need␣square␣and␣nonempty␣matrix");
  if (A.rowsize()!=b.size())
    HDNUM_ERROR("b␣must␣have␣same␣size␣as␣A");
  for (int i=0; i<A.rowsize(); ++i)
    {
      b[i] = 1.0;
      for (int j=0; j<A.colsize(); ++j)
        if (j<=i) A[i][j]=1.0; else A[i][j]=0.0;
    }
}
```

Inhalt

Gewöhnliche Differentialgleichungen in HDNUM

- Erlaube Lösung beliebiger Modelle mit beliebigen Lösern.
- Erlaube variable Typen für Zeit und Zustand.
- Trenne folgende Komponenten:
  - Differentialgleichungsmodell (inklusive Anfangsbedingung),
  - Lösungsverfahren,
  - Steuerung und Zeitschleife.

Differentialgleichungsmodell

Ein Differentialgleichungsmodell ist gegeben durch

- Typen für Zeit und Zustandskomponenten variabel.
- Größe des Systems d.
- Anfangszustand (t_0, u_0).
- Funktion $f(t,x) : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$.
- Optional die Jacobimatrix $f_x(t,x)$ (wird für implizite Verfahren benötigt).
- Für Zustand und Jacobimatrix verwenden wir Vektor- und Matrixklassen aus HDNUM.

Als nächstes ein Beispiel für das Modellproblem

$$u'(t) = \lambda u(t), \quad t \geq t_0, \quad u(t_0) = u_0, \quad \lambda \in \mathbb{R}, \mathbb{C}.$$

Modellproblem I

(Datei examples/num1/modelproblem.hh)

```
 1 /** @brief Example class for a differential equation model
 2
 3     The model is
 4
 5     u'(t) = lambda*u(t), t>=t_0, u(t_0) = u_0.
 6
 7     \tparam T a type representing time values
 8     \tparam N a type representing states and f-values
 9 */
10 template<class T, class N=T>
11 class ModelProblem
12 {
13 public:
14   /** \brief export size_type */
15   typedef std::size_t size_type;
16
17   /** \brief export time_type */
18   typedef T time_type;
19
20   /** \brief export number_type */
21   typedef N number_type;
22
23   //! constructor stores parameter lambda
24   ModelProblem (const N& lambda_)
25     : lambda(lambda_)
26   {}
27
28   //! return number of components for the model
```

Modellproblem II

(Datei examples/num1/modelproblem.hh)

```
29   std::size_t size () const
30   {
31     return 1;
32   }
33
34   //! set initial state including time value
35   void initialize (T& t0, hdnum::Vector<N>& x0) const
36   {
37     t0 = 0;
38     x0[0] = 1.0;
39   }
40
41   //! model evaluation
42   void f (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x, hdnum::Vector<N>& result) const
43   {
44     result[0] = lambda*x[0];
45   }
46
47   //! exact solution if known
48   void exact_solution (const T& t, hdnum::Vector<N>& result) const
49   {
50     result.resize(size());
51     result[0] = exp(lambda*t);
52   }
53
54   //! jacobian evaluation needed for implicit solvers
55   void f_x (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x, hdnum::DenseMatrix<N>& result) c
56   {
```

Modellproblem III

(Datei examples/num1/modelproblem.hh)

```
57       result[0][0] = lambda;
58     }
59
60   private:
61     N lambda;
62   };
```

Differentialgleichungslöser

- Differentialgleichungsmodell ist ein Template-Parameter.
- Typen für Zeit und Zustand werden aus Differentialgleichungsmodell genommen.
- Kapselt aktuellen Zustand und aktuelle Zeit (und evtl. weitere Zustände).
- Methode `step` führt einen Schritt des Verfahrens durch.

Als nächstes ein Beispiel für den expliziten Euler.

Expliziter Euler I

(Datei examples/num1/expliciteuler.hh)

```
 1 /** @brief Explicit Euler method as an example for an ODE solver
 2
 3     The ODE solver is parametrized by a model. The model also
 4     exports all relevant types for time and states.
 5     The ODE solver encapsulates the states needed for the computation.
 6
 7     \tparam M the model type
 8 */
 9 template<class M>
10 class ExplicitEuler
11 {
12 public:
13   /** \brief export size_type */
14   typedef typename M::size_type size_type;
15
16   /** \brief export time_type */
17   typedef typename M::time_type time_type;
18
19   /** \brief export number_type */
20   typedef typename M::number_type number_type;
21
22   //! constructor stores reference to the model
23   ExplicitEuler (const M& model_)
24     : model(model_), u(model.size()), f(model.size())
25   {
26     model.initialize(t,u);
27     dt = 0.1;
28   }
```

Expliziter Euler II

(Datei examples/num1/expliciteuler.hh)

```
29
30    //! set time step for subsequent steps
31    void set_dt (time_type dt_)
32    {
33      dt = dt_;
34    }
35
36    //! do one step
37    void step ()
38    {
39      model.f(t,u,f);     // evaluate model
40      u.update(dt,f);     // advance state
41      t += dt;            // advance time
42    }
43
44    //! get current state
45    const hdnum::Vector<number_type>& get_state () const
46    {
47      return u;
48    }
49
50    //! get current time
51    time_type get_time () const
52    {
53      return t;
54    }
55
56    //! get dt used in last step (i.e. to compute current state)
```

Expliziter Euler III

(Datei examples/num1/expliciteuler.hh)

```
57   time_type get_dt () const
58   {
59     return dt;
60   }
61
62 private:
63   const M& model;
64   time_type t, dt;
65   hdnum::Vector<number_type> u;
66   hdnum::Vector<number_type> f;
67 };
```

Lösung und Ergebnisausgabe

Die Lösung eines Differentialgleichungsmodells besteht nun aus

- Instantieren der entsprechenden Objekte für Modell und Löser.
- Zeitschrittschleife bis zur gewünschten Endzeit.
- Speicherung und Ausgabe der Ergebnisse in einem `hdnum::Vector`.
- Visualisierung der Ergebnisse mit `gnuplot`.

Hauptprogramm für Modellproblem I

(Datei examples/num1/modelproblem.cc)

```
 1 #include <iostream>
 2 #include <vector>
 3 #include "hdnum.hh"
 4
 5 #include "modelproblem.hh"
 6 #include "expliciteuler.hh"
 7
 8 int main ()
 9 {
10   typedef double Number;                    // define a number type
11
12   typedef ModelProblem<Number> Model;       // Model type
13   Model model(-1.0);                        // instantiate model
14
15   typedef ExplicitEuler<Model> Solver;      // Solver type
16   Solver solver(model);                     // instantiate solver
17   solver.set_dt(0.02);                       // set initial time step
18
19   hdnum::Vector<Number> times;               // store time values here
20   hdnum::Vector<hdnum::Vector<Number> > states;  // store states here
21   times.push_back(solver.get_time());       // initial time
22   states.push_back(solver.get_state());     // initial state
23
24   while (solver.get_time()<5.0-1e-6) // the time loop
25     {
26       solver.step();                        // advance model by one time step
27       times.push_back(solver.get_time());   // save time
28       states.push_back(solver.get_state()); // and state
```

Hauptprogramm für Modellproblem II

(Datei examples/num1/modelproblem.cc)

```
29      }
30
31    gnuplot("mp2-ee-0.02.dat",times,states);  // output model result
32
33    return 0;
34  }
```

Literatur I

Rannacher, R.: *Einführung in die Numerische Mathematik (Numerik 0)*.
`http://numerik.iwr.uni-heidelberg.de/~lehre/notes`, 2006.

Stoer, J.: *Numerische Mathematik I*.
Springer, 9. Auflage, 2005.