

HDNUM

CPP Review Proyecto para Latinoamérica

Peter Bastian
Universität Heidelberg,
Traducido por John Jairo Leal G,
Universidad Nacional de Colombia,
Línea de investigación en Modelamiento Matemático
4 de septiembre de 2021

Este manual de Hdnum, está basado en la propuesta presentada por la universidad de Heidelberg Alemania en el curso de Lima, Perú en 2020, para introducirse en el manejo de las soluciones de ecuaciones diferenciales ordinarias y parciales.

Índice

1. Introducción	2
1.1. Que es HDNUM?	2
1.2. Instalación de HDNUM 2	3
2. Algebra Lineal	4
2.1. Vectores	4
2.2. Matrices	7
2.3. Método LR	10
2.3.1. Breve explicación del algoritmo	10
2.3.2. Como hacer la descomposición LR	10
2.4. Explicaciones detalladas del algoritmo <code>lr.hh</code>	12
2.5. Método de iteración - archivo <code>newton.hh</code>	14
2.5.1. La clase <code>SquareRootProblem</code>	14

2.5.2.	Clase <code>Newton</code>	16
2.5.3.	Explicaciones detalladas de la clase <code>Newton</code>	17
2.5.4.	La clase <code>Banach</code>	17
2.5.5.	Implementación	18
3.	Ecuaciones diferenciales ordinarias	21
3.1.	Un buen ejemplo de DGL in HDNUM - <code>modelproblem.hh</code>	21
3.2.	Ejemplo de aplicación <code>modelproblem.hh</code>	23
3.3.	El solucionador resuelve DGL - <code>modelproblem.cc</code>	23
3.4.	Que debe poder hacer un solucionador? - <code>expliciteuler.hh</code>	24
3.5.	Insertar Gnuplot en <code>ode.hh</code>	26
3.6.	Proceso de un paso- <code>ode.hh</code>	27
3.6.1.	Los procedimientos en <code>ode.hh</code>	27
3.7.	Método de Runge-Kutta-Verfahren - <code>RungeKutta</code>	28
3.7.1.	Funcionamiento de la clase <code>RungeKutta</code>	28
3.7.2.	Pruebas de orden de coherencia con <code>void ordertest</code>	30
3.8.	Ejemplos de aplicación	31
3.8.1.	Modelo de Hodgkin-Huxley	31
3.8.2.	Problema de los n-cuerpos	31
3.9.	Oscilador de Van der Pol	31
	Appendices	31
	Apéndice A. Pequeño curso de programación	31
	Apéndice B. Comandos de Unix	31
	Referencias	31
	<code>tocdepth5</code>	

1. Introducción

Haremos un breve resumen de HDNUM

1.1. Que es HDNUM?

La biblioteca numérica de Heildeberg HDNUM, es una biblioteca basada en C++ para realizar ejercicios prácticos en clases magistrales, que incluye métodos numéricos para resolver ecuaciones diferenciales ordinarias, la actual versión está disponible en :

<https://parcomp-git.iwr.uni-heidelberg.de/Teaching/hdnum>

Que tiene un control de versiones administrada por `git` . Se pueden publicar versiones específicas en el sitio web de la conferencia correspondiente.

Los objetivos en el desarrollo de HDNUM fueron i) la facilidad de uso (incluida la instalación simple), ii) la demostración de la programación orientada a objetos en la solución de métodos numéricos, así como la posibilidad de realizar cálculos con cualquier grado de precisión sobre la base de la biblioteca de Gnu Multiple Precision ¹. HDNUM ofrece actualmente las siguientes funciones:

- 1) Clases para vectores y matrices
- 2) Solución de sistemas de ecuaciones lineales
- 3) Solución de sistemas de ecuaciones no lineales
- 4) Solución de la ecuación de Poisson utilizando diferencias finitas

1.2. Instalación de HDNUM 2

HDNUM es una biblioteca de "solo encabezado" y no requiere ninguna instalación más que descargar los archivos. La versión actual se puede encontrar usando el siguiente comando para descargarla:

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

Para realizar esto se requiere el programa `git`, el cual está disponible gratuitamente para todos los sistemas operativos. Alternativamente también hay un archivo comprimido `tar` que se puede descargar en la página del evento.

```
$ tar zxvf hdnum-XX.tgz
```

Los siguientes archivos y subdirectorios se pueden encontrar en el directorio instalado o descomprimido:

- `hdnum.hh`: Cabecera que debe estar integrada en los programas en C++ para poder utilizar HDNUM.
- El directorio `mystuff` está destinado a sus programas, pero, por supuesto, puede utilizar cualquier otro directorio. Lo importante es que el compilador contenga la cabecera `hdnum.hh`. El directorio `mystuff` cuenta con un programa de ejemplo para comenzar de inmediato. Este programa se puede compilar de la siguiente forma:

```
$ cd mystuff  
$ g++ -I.. -o example example.cc
```

Otra forma es utilizar el comando `make`, el cual ejecutará el archivo `Makefile` que está en la carpeta, y el cual compilará el programa ejemplo, generando el archivo ejecutable `example` que lo puede correr con `./example`.

¹<https://gmplib.org>

Estos comandos requieren que el compilador GNU C ++ esté instalado en su sistema. En Windows o para otros compiladores, debe adaptar los comandos en consecuencia.

- El directorio **examples** en la carpeta HDNUM contiene muchos ejemplos ordenados para el curso de programación, **num0** y **num1**.
- El directorio **src** en la carpeta HDNUM contiene el código fuente de la biblioteca HDNUM. Estos archivos son utilizados por **hdnum.hh** cuando sea invocado.
- El directorio **programmierkurs** en la carpeta HDNUM contiene el código fuente de este documento
- El directorio **tutorial** en la carpeta HDNUM contiene las diapositivas del curso de programación.

GNU Biblioteca de Multiple Precisión

HDNUM puede realizar cálculos con gran precisión, para esto se requiere la biblioteca GNU Multiple Precision Library (GMP), que se puede obtener de forma gratuita para varios sistemas operativos. Para utilizar GMP debe poner en el archivo **hdnum.hh** la línea:

```
#define HDNUM_HAS_GMP 1
```

Además, las opciones del compilador pueden ser necesarias para que pueda encontrar las bibliotecas y las cabeceras GMP, lo que puede verse así:

```
$ g++ -I.. -I/opt/local/include -o example example.cc -L/opt/local/lib -lgmpxx -lgmp
```

2. Álgebra Lineal

2.1. Vectores

`hdnum::Vector<T>`

- `hdnum::Vector<T>` es una plantilla de Clase.
- Convierte cualquier (número) tipo de datos **T** en un vector.
- También es posible utilizar números complejos con mucha precisión.
- Los vectores se comportan como los conocemos por las matemáticas:
 - Tiene *n* componentes.

- Inicia en el elemento 0 hasta el elemento $n - 1$ numerados consecutivamente.
 - Adición y multiplicación por un escalar.
 - Producto escalar y norma Euclidiana.
 - Multiplicación vector-matriz.
- Los siguientes ejemplos se pueden encontrar en el archivo `vektoren.cc`

Construcción y Acceso

- Construcción con y sin Inicialización

```
hdnum::Vector<float> x(10);           // Vector con 10 elementos
hdnum::Vector<double> y(10,3.14);    // Vector con 10 elementos inicializado
hdnum::Vector<float> a;               // Vector sin elementos
```

- Vectores más específicos

```
hdnum::Vector<std::complex<double> >
    cx(7,std::complex<double>(1.0,3.0));
mpf_set_default_prec(1024); // Establece precision para mpf_class
hdnum::Vector<mpf_class> mx(7,mpf_class("4.44"));
```

- Acceso a un elemento

```
for (std::size_t i=0; i<x.size(); i=i+1)
    x[i] = i;           // Acceso a cada elemento
```

- El objeto vectorial se elimina al final del ciclo for.

Copia y Asignación

- Constructor copia: crea una copia de otro vector

```
hdnum::Vector<float> z(x); // z es copia de x
```

- Asignación, ¡El tamaño también cambia!

```
b = z;           // b copia los datos de z
a = 5.4;         // asignacion a todos los elementos
hdnum::Vector<double> w; // Vector sin elementos
w.resize(x.size()); // Redimensiona el vector
w = x;           // Copia los elementos
```

- Extracto de vectores

```
hdnum::Vector<float> w(x.sub(7,3)); // w es una copia de x[7],...,x[9]
z = x.sub(3,4);                   // z es una copia de x[3],...,x[6]
```

Cálculos y operaciones

- Operaciones de espacio vectorial y producto escalar

```
w += z;           // w = w+z
w -= z;           // w = w-z
w *= 1.23;        // Multiplicacion por escalar
w /= 1.23;        // Division por escalar
w.update(1.23,z); // w = w + a*z
float s;
s = w*z;          // Producto escalar
```

- Mostrando las salidas

```
std::cout << w << std::endl; // Salida por pantalla
w.iwidth(2);                  // Digitos en la salida del indice
w.width(20);                   // Definiendo la cantidad de digitos
w.precision(16);               // Numero de posiciones decimales
std::cout << w << std::endl; // Imprimiendo w
std::cout << cx << std::endl; // Imprimiendo complejos
std::cout << mx << std::endl; // Funciona para mpf_class
```

Visualización

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

[ 0] 1.2042000770568848e+01
[ 1] 1.2042000770568848e+01
[ 2] 1.2042000770568848e+01
[ 3] 1.2042000770568848e+01
```

Funciones auxiliares

```
float d = norm(w);           // Norma Euclidea
d = w.two_norm();            // La misma norma
zero(w);                      // Igual que w=0.0
fill(w,(float)1.0);          // Igual que 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);              // Vector unitario cartesiano
gnuplot("test.dat",w);        // Salida a gnuplot: i w[i]
gnuplot("test2.dat",w,z);      // Salida a gnuplot: w[i] z[i]
```

Funciones

- Ejemplo: Suma de todas las componentes

```
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;
}
```

- Versión mejorada de la función con **template** y uso por referencia

```
template<class T>
T sum (const 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;
}
```

- El uso por referencia es mejor para objetos grandes.

2.2. Matrices

hdnum::DenseMatrix<T>

- hdnum::DenseMatrix<T> Es una plantilla o Template de clase.
- Convierte un elemento tipo T en una matriz.
- También es posible incluir complejos y su precisión.
- Las matrices son como las conocemos en matemáticas:
 - Dimensión de $m \times n$.
 - Inicia en elemento 0 hasta $m - 1$ o, hasta $n - 1$ numerados consecutivamente.
 - El conjunto de las matrices $m \times n$ constituyen un espacio vectorial.
 - Multiplicación de vectores y de matrices.
- Los siguientes ejemplos se pueden encontrar en el archivo `matrizen.cc`

Construcción y acceso

- Construcción con y sin inicialización

```
hdnum::DenseMatrix<float> B(10,10);           // 10x10 Matrix sin inicializar
hdnum::DenseMatrix<float> C(10,10,0.0);       // 10x10 Matrix inicializada
```

- Acceso a elementos

```
for (int i=0; i<B.rowsize(); ++i)
    for (int j=0; j<B.colsize(); ++j)
        B[i][j] = 0.0;           // Ahora la matriz B está inicializada
```

- El objeto matriz se elimina al final del ciclo.

Copia y asignación

- Constructor copia: Crea una matriz como copia de otra

```
hdnum::DenseMatrix<float> D(B); // D copia de B
```

- Asignación y tamaño de las copias

```
hdnum::DenseMatrix<float> A(B.rowsize(),B.colsize()); //Tamaño correcto
A = B;           // Copia
```

- Extractos de matrices (Submatrices)

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

Calculando con matrices

- Operaciones de espacio vectorial: Ojo, las matrices deben tener el tamaño correcto!)

```
A += B;           // A = A+B
A -= B;           // A = A-B
A *= 1.23;        // ó Multiplicación por escalar
A /= 1.23;        // ó División por escalar
A.update(1.23,B); // A = A + s*B
```

- Matrices, Vectores y multiplicación de matrices

```
hdnum::Vector<float> x(10,1.0); // Construimos dos vectores
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
A.sc(x,1);           // Hace x la primera columna de A
A.sr(x,1);           // Hace x la primera fila de A
float d=A.norm_infty(); // Halla la norma de la suma de las filas
d=A.norm_1();         // Halla la norma de la suma de las columnas
```


Funciones de salida auxiliares

■ Salida de matrices

```
std::cout << A.sub(0,0,3,3) << std::endl; // Impresion
A.iwidth(2);                               // Digitos en la salida del indice
A.width(10);                               // Numero total de digitos
A.precision(4);                            // Posiciones decimales
std::cout << A << std::endl; // Nueva publicacion
```

■ Algunas funciones auxiliares

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

Salida de muestra

	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

Funciones con argumentos matriciales

Ejemplo de una función de una matriz A y de un vector b inicializados.

```
template<class T>
void initialize (hdnum::DenseMatrix<T>& A, hdnum::Vector<T>& b)
{
    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;
    }
}
```

En la siguiente sección se tratan los solucionadores de sistemas de ecuaciones. Si el sistema de ecuaciones es lineal, se utiliza el método de descomposición LR o QR. En el caso no lineal, como por ejemplo en el archivo num1, que utiliza iteraciones de punto fijo, se utiliza el método de Newton.

2.3. Método LR

2.3.1. Breve explicación del algoritmo

El método de descomposición LR se utiliza para resolver un sistema de ecuaciones de la forma $Ax = b$. Se busca descomponer la matriz de coeficientes A que es cuadrada en dos matrices, una matriz L matriz triangular inferior y otra matriz R matriz triangular superior, de tal forma que el producto sea $A = LR$. Cuando es necesario realizar intercambio de filas ésto conduce a un sistema de la forma $PA = LR$. Los pivotes aseguran que los elementos de la Diagonal no son cero, de lo contrario no se puede usar el algoritmo.

Por un lado, se hace una distinción entre pivotamiento parcial, que asegura que el elemento más grande de la columna debajo de la diagonal en términos de cantidad se intercambie en la diagonal mediante permutaciones de fila. Con la rotación total, uno mira la matriz completa debajo de la diagonal y busca el elemento más grande en términos de cantidad para cambiarlo a la entrada de la diagonal actual usando operaciones de fila y columna. El elemento más grande en términos de valor absoluto se elige para reducir los errores numéricos.

2.3.2. Como hacer la descomposición LR

Para hacer un programa que resuelva un sistema $Ax = b$ utilizando la descomposición LR, se procede de la siguiente forma:

- Se crea el vector b y la matriz A . veamos el siguiente ejemplo:

```
Vector<number> b(3);  
b[0]=15;  
b[1]=73;  
b[2]=12;  
  
DenseMatrix <number> A(3,3);  
A[0][0]=2;    A[0][1]=1;    A[0][2]=7;  
A[1][0]=8;    A[1][1]=8;    A[1][2]=33;  
A[2][0]=-4;   A[2][1]=10;   A[2][2]=4;
```

- Además, necesitamos los vectores x y p . Si se realiza un pivoteo total, se debe crear otro vector q . Para mejorar la condición de la matriz, las funciones `row_equilibrate` y `apply_equilibrate` se pueden necesitar para lo cual se requiere un vector adicional s :

```
Vector<number> x(3,0.0);  
Vector<number> s(3);  
Vector<std::size_t> p(3);  
Vector<std::size_t> q(3);
```

- Como ya se mencionó en el punto anterior, el condicionamiento de la matriz A se puede mejorar desde el principio. Esto se hace usando las funciones `row_equilibrate` y `apply_equilibrate`. La aplicación de los comandos se puede ver en los siguientes ejemplos.
- Ahora se aplica una de las siguientes funciones a la matriz A y al vector de permutación p creado previamente. En nuestro ejemplo realizamos un pivoteo total, por lo que necesitamos el vector adicional q :

```
row_equilibrate (A,s);
lr_fullpivot(A,p,q);
```

La función `lr_partialpivot` se utilizará para el pivoteo parcial y la función `lr` se utilizará para la descomposición LR sin pivotar. (El vector de permutación adicional q no es necesario aquí.) Ahora podemos usar el sistema de ecuaciones para resolver distintos lados derechos.

- Para esto necesitamos preparar el lado derecho de la siguiente forma:

```
apply_equilibrate(s,b);
permute_forward(p,b);
```

- Luego llamamos a la función `solveL`, que recibe la matriz A , el vector de la derecha por un vector y como parámetros en los que se almacena la solución del sistema de ecuaciones $Ly = b$. Para ahorrar espacio de almacenamiento se puede escribir el resultado en el vector ya existente b .
- Finalmente, se requiere la función `solveR`, que resuelve el sistema de ecuaciones $Rx = y$. La función necesita la matriz A , el vector de la derecha y (del sistema de ecuaciones $Ly = b$) así como el vector x , en el que se guarda el resultado final:

```
solveL(A,b,b);
solveR(A,x,b);
```

- Si se ha realizado un pivoteo total, las permutaciones que se almacenaron en el vector q (transformaciones de columna de A) deben aplicarse al resultado x usando `permute_backward`:
- La solución del sistema lineal de ecuaciones ahora se almacena en el vector x . En nuestro caso:

```
x[0] = 1
x[1] = 2
x[2] = 3
```

2.4. Explicaciones detalladas del algoritmo `lr.hh`

- **La función `lr`:** Al principio se comprueba para todas las funciones si existe una matriz cuadrada no vacía y si el vector p es compatible con la matriz dada. El primer bucle `for` busca una fila de la matriz cuyo elemento diagonal no sea igual a cero. A continuación, esta línea se compara con la de la corriente. Todos los elementos diagonales intercambiados. Las permutaciones que resultan de la búsqueda pivote se almacenan en el vector p .

```
for (std::size_t k=0; k<A.rowsize()-1; ++k)
{
    Encontrar el elemento pivote e intercambiar filas
    for (std::size_t r=k; r<A.rowsize(); ++r)
        if (A[r][k]!=0)
        {
            p[k] = r;    // Almacenar la permutacion en el paso k
            if (r>k)      // Intercambiar todas las filas si r!=k
                for (std::size_t j=0; j<A.colsize(); ++j)
                {
                    T temp(A[k][j]);
                    A[k][j] = A[r][j];
                    A[r][j] = temp;
                }
            break;
        }
    if (A[k][k]==0) HDNUM_ERROR("matrix is singular");
    // Modificacion
    for (std::size_t i=k+1; i<A.rowsize(); ++i)
    {
        T qik(A[i][k]/A[k][k]);
        A[i][k] = qik;
        for (std::size_t j=k+1; j<A.colsize(); ++j)
            A[i][j] -= qik * A[k][j];
    }
}
```

En el segundo ciclo *for*, se crea la matriz triangular con la matriz A permutada.

- **La función `lr_partialpivot`:** Parametros : Matriz A y vector de permutación p . Ésta función realiza un pivoteo parcial. Procede de la siguiente manera: Primero, el vector p se inicializa describiéndolo con los valores de 0 a $n - 1$ (Donde $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$). Luego, el elemento pivote (el elemento más grande en términos de magnitud) se busca en la columna actual debajo del elemento diagonal en la matriz A y la permutación requerida para cambiarlo a la diagonal que se almacena en el vector p :

```
for (std::size_t k=0; k<A.rowsize()-1; ++k)
{
    // finde Pivotelement
```

```

for (std::size_t r=k+1; r<A.rowsize(); ++r)
    if (abs(A[r][k])>abs(A[k][k]))
        p[k] = r; // Guarda la permutacion en el paso k
}

```

En el siguiente ciclo, las líneas k y j se intercambian de modo que el elemento pivote se encuentre en la diagonal.

- **La función `lr_fullpivot`:** Funciona de manera similar a la función anterior `lr_partialpivot`, pero necesita un vector adicional q para poder realizar un pivoteo total. No solo es posible intercambiar filas, sino también intercambiar columnas, que se almacenan en el vector q .

- **La función `permute_forward`:** El vector p ha almacenado las permutaciones necesarias. En esta función, las permutaciones de línea se transfieren al vector:

```

for (std::size_t k=0; k<b.size()-1; ++k)
    if (p[k]!=k)
    {
        T temp(b[k]);
        b[k] = b[p[k]];
        b[p[k]] = temp;
    }

```

- **La función `permute_backward`:** Ésta función se utiliza al final del algoritmo LR para deshacer las permutaciones realizadas en la función `permute_forward` para el vector de la derecha.
- **La función `row_equilibrate`:** Esta función se utiliza antes del algoritmo actual para mejorar la condición de la matriz de (equilibrio). Los valores por los que se dividen las filas de la matriz se almacenan en el vector s :

```

for (std::size_t k=0; k<A.rowsize(); ++k)
{
    s[k] = T(0.0);
    for (std::size_t j=0; j<A.colsize(); ++j)
        s[k] += abs(A[k][j]);
    if (s[k]==0) HDNUM_ERROR("row_sum_is_zero");
    for (std::size_t j=0; j<A.colsize(); ++j)
        A[k][j] /= s[k];
}

```

- **La función `apply_equilibrate`:** Los cambios que se hicieron a la matriz A también se aplican aquí al vector b para obtener la solución correcta.
- **La función `solveL`:** Parámetros : Vector x y el vector b . Ésta función resuelve la ecuación $Lx = b$. Aquí x se determina iterativamente de la siguiente forma:

$$x_i = b_i - \sum_{j=0}^{i-1} l_{ij}x_j$$

```

for (std::size_t i=0; i<A.rowsize(); ++i)
{
    T rhs(b[i]);
    for (std::size_t j=0; j<i; j++)
        rhs -= A[i][j] * x[j];
    x[i] = rhs;
}

```

- **La función solveR:** Ésta función resuelve la ecuación $Rx = b$. Por lo tanto el vector x se determina de la siguiente manera: $x_i = b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} r_{ij}x_j$ (aquí está $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

```

for (int i=A.rowsize()-1; i>=0; --i)
{
    T rhs(b[i]);
    for (std::size_t j=i+1; j<A.colsize(); j++)
        rhs -= A[i][j] * x[j];
    x[i] = rhs/A[i][i];
}

```

2.5. Método de iteración - archivo newton.hh

Ahora sabemos cómo resolver sistemas lineales de ecuaciones de la forma $Ax = b$. Pero, ¿qué se debe hacer si el sistema de ecuaciones no es lineal, por ejemplo, en el caso simple y unidimensional $x^2 = a$? En el curso se aprenderán procedimientos que utilizan iteraciones de punto fijo para acercarse mucho a la solución. El archivo `newton.hh` proporciona herramientas útiles para resolver este tipo de ecuaciones y sistemas de ecuaciones. El más importante es el método de Newton, con el que se pueden resolver ecuaciones no lineales de la forma $F(x) = 0$. Pero primero consideramos la formulación concreta de un problema en una clase.

2.5.1. La clase SquareRootProblem

Para poder resolver un sistema no lineal de ecuaciones de la forma $f(x) = 0$, primero debemos crear una clase para nuestro problema. Además de un constructor adecuado e información sobre la dimensión del problema, esto requiere un método que proporcione el valor de la función y otro que proporcione la derivada de la función. Mostramos esto con el ejemplo de la clase `SquareRootProblem`:

```

class WurzelProblem
{
public:
    typedef std::size_t size_type;
    typedef N number_type;
    WurzelProblem (number_type a_);
    std::size_t size () const;
    void F (const Vector<N>& x, Vector<N>& result) const;

```

```

    void F_x (const Vector<N>& x, DenseMatrix<N>& result) const;

private:
    number_type a;
};

```

- Typedef:

```

typedef std::size_t size_type;
typedef N number_type;

```

Las definiciones de tipo al principio no son métodos, pero son igualmente importantes. No sabemos de antemano qué tipo de datos se utilizará en última instancia. Las definiciones de tipo están ahí para que el solucionador pueda reconocer más tarde con qué tipo de número está trabajando realmente la clase.

- Constructor:

```

WurzelProblem::WurzelProblem (number_type a_)
: a(a_)
{}

```

Esto nos da la oportunidad de resolver varios problemas de la forma $x^2 = a$ pasando la a deseada al constructor.

- Dimensión:

```

std::size_t Wurzelproblem::size () const
{
    return 1;
}

```

- Valor de la función: $f(x) = x^2 - a$:

```

void Wurzelproblem::F (const Vector<N>& x, Vector<N>& result) const
{
    result[0] = x[0]*x[0] - a;
}

```

Necesitamos esta forma especial porque solo podemos resolver problemas de la forma $f(x) = 0$.

- Derivación: $f'(x) = 2x$:

```

void Wurzelprobelem::F_x (const Vector<N>& x,
    DenseMatrix<N>& result) const
{
    result[0][0] = number_type(2.0)*x[0];
}

```

(La derivada debe calcularse manualmente.)

Ahora que hemos creado nuestra clase, debemos crear el objeto z.B del problema $x^2 = 5$, crear y resolver esto con el método de Newton. Para ello, procedemos de la siguiente manera:

- Crear el objeto del problema con `WurzelProblem` con el nombre "problem", que representa la ecuación $x^2 = 5$:

```
WurzelProblem<Number> problem(5.0);
```

Ahora tenemos que crear un objeto de la clase `Newton` y establecer varios parámetros:

2.5.2. Clase Newton

- De la siguiente manera, puede crear una instancia de la clase `Newton` y establecer todos los parámetros:

```
Newton newton;           // Crea un objeto newton
newton.set_maxit(20);     // Numero maximo de iteraciones
newton.set_verbosity(2);  // Detalle del gasto
newton.set_reduction(1e-100); // Factor de reduccion
newton.set_abslimit(1e-100); // Maximo error en valor absoluto
newton.set_linesearchsteps(3); // Numero maximo de pasos para la busqueda
```

- Finalmente necesitamos un vector u , en el que se almacena la solución. Éste debe tener el mismo tamaño que nuestro problema:

```
Vector<Number> u(problem.size());
```

- Aquí establecemos el valor inicial para el método de Newton en 17. Por supuesto, se puede seleccionar otro valor, pero debe asegurarse de que el valor inicial no esté demasiado lejos de la solución, ya que el método de Newton no es globalmente convergente.

```
u[0]=17.0;
```

- Ahora podemos aplicar el método `solve` de la clase de `Newton` a nuestro problema:

```
newton.solve(problem,u);
```

- Como solución a este problema raíz en particular, obtenemos el resultado:
 $u = 2,2361e + 00$

Se pueden resolver estos problemas no solo con el método de Newton, como ya se ha visto, sino también con la ayuda de la clase `Banach`.

2.5.3. Explicaciones detalladas de la clase Newton

La clase Newton consiste esencialmente de un método `solve` que se puede utilizar para resolver sistemas de ecuaciones no lineales. Además de éste método, también hay algunos parámetros de procedimiento, como el número máximo de iteraciones, que se pueden configurar en el constructor.

Para resolver, primero se comprueba si el residuo $r = F(x)$ ya es menor que el error `abslimit`. Si es así, el valor inicial ya es suficientemente aceptable y el proceso ha terminado. En otro caso, la dirección de búsqueda se determina utilizando la descomposición LR , $z_k = \nabla f(x_k)^{-1} f(x_k)$. Usando un método de búsqueda de línea simple y un λ apropiado en $x_{k+1} = x_k - \lambda z_k$

```
for (size_type k=0; k<linesearchsteps; k++)
{
    y = x;
    y.update(-lambda,z);           // y = x-lambda*z
    model.F(y,r);                 // r = F(y)
    N newR(norm(r));              // Norma calculada
}
if (newR<(1.0-0.25*lambda)*R)    // Comprobacion de la convergencia
{
    x = y;
    R = newR;
    break;
}
else lambda *= 0.5;              // Reduccion del factor de amortiguaci
if (R<=reduction*R0)            // Comprobacion de la convergencia
{
    converged = true;
    return;
}
```

2.5.4. La clase Banach

- Soluciona un sistema no lineal de la forma $F(x) = 0$ usando el método de iteración del punto fijo $x = x - \sigma * F(x)$
- La función más importante es la función `solve`, que permite obtener la solución real
- Éste método hace uso del teorema del punto fijo de Banach.
- Una implementación concreta, utiliza la clase `Banach` no está incluida en ésta documentación ya que es similar a la clase `Newton` que está funcionando. Se puede ver un ejemplo en el archivo `wurzelbanach.cc`. La única diferencia está en el parámetro sigma, que también se debe tener en cuenta con Banach.

2.5.5. Implementación

```
class Banach
{
    typedef std::size_t size_type;
public:
    Banach ()
        : maxit(25), linesearchsteps(10), verbosity(0),
          reduction(1e-14), abslimit(1e-30), sigma(1.0), converged(false);
    void set_maxit (size_type n);
    void set_sigma (double sigma_);
    void set_linesearchsteps (size_type n);
    void set_verbosity (size_type n);
    void set_abslimit (double l);
    void set_reduction (double l);
    template<class M>
    void solve (const M& model, Vector<typename M::number_type> x) const;
    bool has_converged () const;

private:
    size_type maxit;
    size_type linesearchsteps;
    size_type verbosity;
    double reduction;
    double abslimit;
    double sigma;
    mutable bool converged;
};
```

- Con Typedef ahorra papeleo y es más claro, en cuanto al tamaño.

```
typedef std::size_t size_type;
```

- En el constructor, los valores se asignan a todos los parámetros privados,...

```
Banach::Banach ()
    : maxit(25), linesearchsteps(10), verbosity(0),
      reduction(1e-14), abslimit(1e-30), sigma(1.0), converged(false)
{}

```

- ...que luego se pueden cambiar con las siguientes funciones. El parámetro "maxit" asegura que el solucionador que se explica más adelante no quede en un bucle infinito en el caso de que no haya convergencia en la iteración del punto fijo, en cuyo caso aborta e informa que no hay convergencia.

```
void Banach::set_maxit (size_type n)
{
    maxit = n;
}
```

- Aquí se ajusta el parametro σ .

```
void Banach::set_sigma (double sigma_)
{
    sigma = sigma_;
}
```

- Cuántos pasos debe tomar el solucionador, antes de abortar?, se puede configurar aquí.

```
void Banach::set_linesearchsteps (size_type n)
{
    linesearchsteps = n;
}
```

- Control de salida: cuanto mayor sea el número establecido, más información se precisa sobre la convergencia en la consola. Lo que significan los números individuales, sin embargo, debe verse en el código fuente si es necesario.

```
void Banach::set_verbosity (size_type n)
{
    verbosity = n;
}
```

- Tolerancia a fallos

```
void Banach::set_abslimit (double l)
{
    abslimit = l;
}
```

- Factor de Reducción

```
void Banach::set_reduction (double l)
{
    reduction = l;
}
```

- Con el método `solve` se puede resolver un modelo dado recurriendo a los miembros privados”.

```
template<class M>
void Banach::solve (const M& model, Vector<typename M::number_type> x) const
{
    typedef typename M::number_type N;
    Vector<N> r(model.size());           // Residuo
    Vector<N> y(model.size());           // Soluciones temporales

    model.F(x,r);                        // Calculo del residuo no lineal
    N R0(norm(r));                        // Norma del residual inicial
```

```

N R(R0);                                // Norma de la corriente residual

converged = false;

// Maximo de iteraciones especificadas en la matriz
for (size_type i=1; i<=maxit; i++)
{
    if (R<=abslimit)                    //Verifica el valor absoluto del residuo
    {
        converged = true;
        return;
    }
}

```

En caso de que el resultado preliminar no fuera lo suficientemente preciso ($\leq \text{abslimit}$), pasa a la siguiente iteración real y luego se usa un estándar para probar si el resultado es ahora lo suficientemente preciso y luego se regresa al comienzo del ciclo for. Si el resultado es lo suficientemente preciso, la función ha cumplido su propósito y termina.

```

// next iterate
y = x;
y.update(-sigma,r);                    // y = x-sigma*z
model.F(y,r);                          // r = F(y)
N newR(norm(r));                       // Calcular la norma

x = y;                                // óAdopción de las nuevas iteraciones
R = newR;                              // Almacenamiento estandar

// Chequea la convergencia
if (R<=reduction*R0 || R<=abslimit)
{
    converged = true;
    return;
}
}

```

- El valor booleano se establece como falso por defecto en principio. Resuelve la función `solve` Si el sistema de ecuaciones tiene éxito, establece el valor en verdadero y este valor se retiene como un miembro privado de la clase. Esta función le dice si el método de punto fijo ya ha tenido éxito y, por lo tanto, también lo volverá a tener éxito.

```

bool Banach::has_converged () const
{
    return converged;
}

```

3. Ecuaciones diferenciales ordinarias

El siguiente capítulo trata sobre el tema central de la conferencia. Numéricos 1, resolviendo ecuaciones diferenciales ordinarias. Repetir: se trata de una ecuación en la que se da una función así como las derivadas de la función y se intenta averiguar qué función cumple la ecuación. HDNUM proporciona algunas herramientas útiles para resolver este tipo de ecuaciones diferenciales. Muestra cómo preparar una ecuación diferencial para que pueda ser resuelta por un solucionador (cómo el funcionamiento individual se deja a la lección y sus demostraciones) y al mismo tiempo contiene varios de estos solucionadores. El hecho es que tanto las ecuaciones diferenciales como los solucionadores están empaquetados en clases. Estas clases deben tener ciertos métodos para ser compatibles entre sí. Comencemos con un ejemplo de ecuación diferencial:

3.1. Un buen ejemplo de DGL in HDNUM - modelproblem.hh

- Este archivo sólo contiene la clase `ModelProblem`, que contiene exactamente los métodos necesarios para la compatibilidad con todos los solucionadores de HDNUM. ¡Así que cada clase de ecuación diferencial debe tener exactamente estas declaraciones de método!
- La información completa sobre una ecuación diferencial está contenida en la implementación de los métodos.
- El archivo está escrito para que los objetos de la clase `ModelProblem` Los problemas modelo en el sentido de la lección son, pero pueden reescribirse para cualquier ecuación diferencial. Cabe señalar que todos los jefes de función de los métodos no se modifican. Esta es la única forma de mantener el nuevo DGL compatible con nuestros solucionadores.
- Un objeto de la clase de `Modelproblem` corresponde entonces a una ecuación diferencial a resolver.
- Si el archivo está incluido en el encabezado, los objetos de la clase de problema del modelo se pueden crear en el programa y luego resolver con el conocimiento de las siguientes secciones.

```
template<class T, class N=T>
class ModelProblem
{
public:
    typedef std::size_t size_type;
    typedef T time_type;
    typedef N number_type;

    ModelProblem (const N& lambda_)
```

```

        : lambda(lambda_);

    std::size_t size () const;
    void initialize (T& t0, hdnum::Vector<N>& x0) const; //Valores iniciales
    void f (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x,          //óFunción f
            hdnum::Vector<N>& result) const;
    void f_x (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x, //Matriz Jacobiana de f
              hdnum::DenseMatrix<N>& result) const;

private:
    N lambda;
};

```

- Las definiciones de tipo al principio no son métodos, pero merecen una breve explicación. Puede ver a partir de esto que es una clase de plantilla y nunca está claro desde el principio qué tipo de datos se está utilizando realmente. Las definiciones de tipo están ahí para que el solucionador pueda reconocer más tarde con qué tipo de número está trabajando realmente la clase de modelo. Los usamos para poder trabajar con tipos de datos muy precisos (precisión múltiple).
- El constructor inicializa los parámetros privados si es necesario. Pero no siempre tiene que haber tal cosa.

```

template <class T, class N=T>
ModelProblem::ModelProblem (const N& lambda_)
    : lambda(lambda_)
{}

```

- Con esta función se determina qué dimensión tiene la ecuación diferencial a resolver.

```

template <class T, class N=T>
std::size_t ModelProblem::size () const
{
    return 1;
}

```

- Los valores iniciales se establecen aquí. t_0 es el valor inicial en el tiempo, mientras que x_0 es el vector de los valores iniciales. Entonces, en el unidimensional, contiene solo una entrada.

```

template <class T, class N=T>
void ModelProblem::initialize (T& t0, hdnum::Vector<N>& x0) const
{
    t0 = 0;
    x0[0] = 1.0;
}

```

- La función f contiene la ecuación diferencial real. El vector `result`, entonces la solución de la función f en el momento. `t` calculado.

```
template <class T, class N=T>
void ModelProblem::f (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x,
    hdnum::Vector<N>& result) const
{
    result[0] = lambda*x[0];
}
```

- Esta función representa la matriz jacobiana de la función f en `result` a disposición. Esto es requerido por solucionadores implícitos.

```
template <class T, class N=T>
void ModelProblem::f_x (const T& t, const hdnum::Vector<N>& x,
    hdnum::DenseMatrix<N>& result) const
{
    result[0] = lambda;
}
```

- Cualquier parámetro que pueda ser necesario se encuentra en la parte privada de la clase.

3.2. Ejemplo de aplicación modelproblem.hh

El archivo `modelproblem_high_dim.hh` es una reformulación del archivo `modelproblem.hh` y pone la ecuación diferencial $u'(t) = \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} * u(t)$ con valor inicial $u(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ allí. Esto lo convierte en un ejemplo de la representación de un Ecuación diferencial.

3.3. El solucionador resuelve DGL - modelproblem.cc

- Este archivo es un excelente ejemplo de resolución de problemas Ecuaciones diferenciales.
- Muestra cómo combinar la clase de ecuación diferencial y la clase de solucionador de tal manera que la ecuación diferencial se resuelve y el resultado se escribe en un archivo de tal manera que se puede trazar.

```
#include <iostream>
#include <vector>
#include "hdnum.hh"
#include "modelproblem.hh"
#include "expliciteuler.hh"
```

Además de las bibliotecas, el encabezado también incluye el problema del modelo y un archivo para resolver la ecuación diferencial. En este caso, la ecuación diferencial debe resolverse con el Euler explícito.

```

int main ()
{
    typedef double Number;           // Define el tipo de numero
    typedef ModelProblem<Number> Model; // Define el tipo de modelo
    Model model(-1.0);                // Objeto de la clase con lambda = -1
    typedef ExplicitEuler<Model> Solver; // Elige el solucionador
    Solver solver(model);              // Inicializar el solucionador con el modelo
    solver.set_dt(0.02);               // Establecer intervalos de tiempo
    hdnum::Vector<Number> times;        // Vector para intervalos de tiempo
    hdnum::Vector<hdnum::Vector<Number>> states; // Vector de soluciones
    times.push_back(solver.get_time()); // Guarda la hora de inicio
    states.push_back(solver.get_state()); // Guarda el valor inicial en el vector
    while (solver.get_time() < 5.0-1e-6) // Bucle para aflojar
    {
        solver.step();
        times.push_back(solver.get_time()); // Ahorrar tiempo
        states.push_back(solver.get_state()); // Ahorra el valor
    }

    gnuplot("mp2-ee-0.02.dat", times, states); // La salida esta en la seccion
                                              // explicado sobre Gnuplot
    return 0;
}

```

Un ejemplo alternativo es el archivo `modelproblem_high_dim.cc`. Pasado por Solver EE otros solucionadores `ode.hh` (Ver explicación a continuación) reemplazado, se puede resolver el DGL con diferentes medios y ver un ejemplo de que un DGL con todos nuestros solucionadores es compatible.

3.4. Que debe poder hacer un solucionador? - `expliciteuler.hh`

- Este archivo contiene la clase `ExplicitEuler`.
- La clase contiene todos los métodos que necesita un solucionador en nuestro contexto.
- Todos los solucionadores tienen al menos los métodos que `ExplicitEuler` tiene, tal vez algunos más.
- Con la ayuda de este archivo puede resolver todas las ecuaciones diferenciales que tienen la representación mencionada anteriormente en una clase.

```

template<class M>
class ExplicitEuler
{
public:
    typedef typename M::size_type size_type;
    typedef typename M::time_type time_type;

```



```

typedef typename M::number_type number_type;

ExplicitEuler (const M& model_)
: model(model_), u(model.size()), f(model.size());
void set_dt (time_type dt_);
void step ();
const hdnum::Vector<number_type>& get_state () const;
time_type get_time () const;
time_type get_dt () const;

private: //Die private Member sind bei jedem Solver ähnlich.
const M& model; //Referenz auf das Model ist IMMER vorhanden
time_type t, dt; //Zeitlichen Variablen
hdnum::Vector<number_type> u; //Vektor zur Speicherung von Zeitschritten
hdnum::Vector<number_type> f; //mindestens einem Vektor
// zur Speicherung von Loesungen
};

```

- Primero, un breve comentario sobre las definiciones de tipo al principio: Inicialmente, el solucionador solo obtuvo una referencia a un modelo en el constructor. Sin embargo, todavía no está claro qué tipos de números se utilizan en el modelo y si se pueden llamar a sus funciones. Los typedefs se utilizan para determinar esto. Por lo tanto, el solucionador puede resolver DGL para cualquier tipo de número y solo cuando se compila se determina cuál se refiere realmente.
- El constructor almacena una referencia al modelo que se supone que debe resolver. Además, aquí se especifican los parámetros para el algoritmo de solución, como el tamaño de los pasos de tiempo, los valores iniciales o similares.

```

template<class M>
ExplicitEuler::ExplicitEuler (const M& model_)
: model(model_), u(model.size()), f(model.size())
{
    model.initialize(t,u);
    dt = 0.1;
}

```

- Dado que Solver calcula la solución (tiempo) paso a (tiempo) paso, puede determinar qué tan grandes deben ser estos pasos. Cuanto mayores sean los pasos, menos preciso será el resultado, pero menor será el esfuerzo computacional.

```

template<class M>
void ExplicitEuler::set_dt (time_type dt_)
{
    dt = dt_;
}

```

- El algoritmo de solución real está en la función de paso. Decide cómo pasar de un paso al siguiente. Así que aquí está el algoritmo del Euler explícito.

```
template<class M>
void ExplicitEuler::step ()
{
    model.f(t,u,f);    // Calcular el valor de f en el punto t
    u.update(dt,f);    // El siguiente valor de la funcion se altera valor+dt*f(t)
    t += dt;           // El tiempo aumenta un valor dt
}
```

- El vector solución calculado hasta ahora:

```
template<class M>
const hdnum::Vector<number_type>& ExplicitEuler::get_state () const
{
    return u;
}
```

- El tiempo que se acaba de calcular:

```
template<class M>
time_type ExplicitEuler::get_time () const
{
    return t;
}
```

- Actualiza dt (tamaño del paso):

```
template<class M>
time_type ExplicitEuler::get_dt () const
{
    return dt;
}
```

3.5. Insertar Gnuplot en ode.hh

Por supuesto, un solucionador numérico no puede proporcionarnos una solución analítica de una ecuación diferencial en forma de función concreta. Pero puede decirnos cómo se ve la función de solución en muchos puntos. Para que podamos hacer algo con estas muchas tuplas numéricas, las visualizamos con Gnuplot. Las siguientes funciones de plantilla nos facilitan esto y escriben el resultado en el formato correcto en un archivo para que luego podamos trazarlo directamente.

1.

```
void gnuplot (const std::string& fname, const std::vector<T> t,
              const std::vector<Vector<N> > u)
```

¡Solo apto para DGL unidimensional! La función recibe un nombre de archivo (.dat) entre comillas, así como la hora y el vector de solución. La función asegura que los datos estén en una especie de tabla en un archivo con el nombre deseado. A continuación, este archivo se puede trazar.

```
2. void gnuplot (const std::string& fname, const std::vector<T> t,
    const std::vector<Vector<N> > u, const std::vector<T> dt)
```

¡Adecuado para DGL bidimensional! Pasas los mismos datos a la función que arriba más el segundo vector de solución. El resultado también es análogo. Sin embargo, al trazar, debe tener en cuenta las peculiaridades de la multidimensionalidad.

Como plantilla de ejemplo, el código de la sección anterior se puede ver al final. Los comandos de Gnuplot más importantes en la terminal:

1. `gnuplot` - abre Gnuplot
2. `plot 'dateiname.dat' using 1:2` - grafica en dos dimensiones usando las columnas 1 vs 2
3. `plot 'dateiname.dat' using 1:2, 'dateiname.dat' using 1:3` - traza gráficas 1 vs 2, y 1 vs 3.
4. `splot 'dateiname.dat' using 1:2:3` - Grafica en tres dimensiones
5. `exit` - termina Gnuplot

3.6. Proceso de un paso- `ode.hh`

Ahora que hemos visto cómo se empaquetan exactamente una ecuación diferencial y un solucionador en una clase para que sean compatibles entre sí y cómo luego se resuelve la ecuación diferencial con el solucionador, podemos pasar a ver varios de estos solucionadores. En la conferencia conocerás los métodos implícitos y explícitos de Runge-Kutta como los ejemplos más importantes. El Euler explícito, que teníamos antes como ejemplo, también es parte de él. En el archivo `ode.hh` se implementan varios de estos solucionadores. Para que pueda resolver cualquier ecuación diferencial (nuevamente empaquetada en una clase, por supuesto) con cada solucionador, todas estas clases de solucionador tienen métodos con los mismos cabezales de función. Solo en la forma en que se implementan estas funciones difieren, lo que luego define el procedimiento individual. Además de los métodos de la clase discutidos anteriormente `ExplicitEuler` tener las clases en `ode.hh` algunas funciones adicionales. Los métodos con control de tamaño de paso también se modifican ligeramente.

3.6.1. Los procedimientos en `ode.hh`

- Método explícito de Runge-Kutta
 - EE - Método explícito de Euler
 - `ModifiedEuler`
 - `Heun2`

- Heun3
- Kutta3
- RungeKutta4
- Método implícito de Runge-Kutta
 - IE - Método implícito de Euler
 - DIRK -Procedimiento implícito diagonal
- Control de tamaño del paso
 - RKF45
 - RE - Extrapolación de Richardson

3.7. Método de Runge-Kutta-Verfahren - RungeKutta

Esta clase está construida para resolver una ecuación diferencial con un método de RungeKutta explícito o implícito. Se debe implementar de la misma forma como se realizó anteriormente.

3.7.1. Funcionamiento de la clase RungeKutta

La única diferencia con el manejo de otra clase de solucionador es que al constructor de la clase, se le debe pasar la tabla del método deseado.

La cabecera de funciones en el Namespace de hdnum tiene el siguiente aspecto:

```
M& model, DenseMatrix<number_type> A_, Vector<number_type> b_,
Vector<number_type> c_)
```

La matriz $A_$ y los vectores $b_$ y $c_$ provienen directamente de cuadro de Butcher. Todo lo demás es entonces análogo a las otras clases de solucionadores. N es un parámetro de la plantilla de clase. Si desea utilizar el método de Banach en lugar del método de Newton para resolver sistemas de ecuaciones no lineales, Banach es un segundo parámetro de plantilla que escribe delante de él al crear un objeto. En este caso, también tiene sentido agregar otro argumento al constructor al final *number_type sigma_* a entregar. Se implementa el constructor correspondiente. Entonces podría verse así:

```
Solver(model, A, b, c, 0.5)
```

El modelo entonces tendría que ser un problema de modelo del tipo Modelo y A una matriz $n \times n$, también b y c vectores n -dimensionales. El sigma en el método de Banach sería 0,5 en este caso.

Los algoritmos detrás de la función void step

- La función `step` diferencia desde el principio si se trata de un procedimiento explícito o implícito. (La función de prueba reconoce esto en el panel Butcher).

- En el caso explícito, todos los valores son conocidos y privados. Variables guardadas en $u_n^h = u_{n-1}^h + h_n(b_1k_1 + \dots + b_s k_s)$ por medio de $k_1 = f(t_{n-1}, u_{n-1}^h)$, $k_i = f(t_{n-1} + c_i h_n, u_{n-1}^h + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j)$ calcular. La función f se convierte en una clase de problema previsto
- En el caso implícito se aplica $k_i = f(t_{n-1} + c_i h_n, u_{n-1}^h + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j)$ por $i = 1, \dots, s$ para resolver y con eso $u_n^h = u_{n-1}^h + h_n \sum_{i=1}^s b_i k_i$ para determinar. Numéricamente, sin embargo es más fácil comenzar con $z_i := h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j$ por $i = 1, \dots, s$ para calcular y luego el k_i encima $K = h_n^{-1} A^{-1} Z$ para determinar. Donde K y Z vectores de vectores.

Si b^T es igual a la última línea de A , uno puede mirar el cálculo de la k_i guardar, actualizar y calcular $u_n^h = u_{n-1}^h + z_s$. Los sistemas de ecuaciones no lineales para el cálculo de z_i se resuelven opcionalmente con el método de Banach o Newton, para lo cual se crea una clase de problema.

- Tanto para el método de Banach como para el de Newton, se requiere una clase de problema específica que modele el problema a resolver. En nuestro caso, esto se hace mediante la clase `ImplicitRungeKuttaStepProblem`. Esto se inicializa en el constructor con todas las variables importantes de la clase `RungeKutta`. Sin embargo, es importante saber que los métodos de Banach y Newton no pueden calcular ceros de funciones que tienen vectores de vectores como argumentos. Por lo tanto, hay que entender Z como un vector de tamaño $n * s$ y solo entonces de nuevo a s vectores calcular de nuevo el tamaño n .
- El corazón de la clase `ImplicitRungeKuttaStepProblem` son las funciones `void F` y `void F_x`. En el primero, se modela la función, que se cancela cuando se encuentran los z_i correctos, mientras que la segunda función solo se requiere en el método de Newton y proporciona la matriz jacobiana de la primera función.
- La función F se ve como esto:

$$F : \mathbb{R}^{n*s} \rightarrow \mathbb{R}^{n*s}, \begin{pmatrix} z_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ z_s \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} F_1(z_1, \dots, z_s) \\ \vdots \\ \vdots \\ F_s(z_1, \dots, z_s) \end{pmatrix}$$

por lo cual $F_i(z_1, \dots, z_s) = z_i - h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_{n-1} + c_j h_n, u_{n-1}^h + z_j)$ por $i = 1, \dots, s$.

- La matriz jacobiana a calcular es una matriz de bloques $s \times s$ Bloques de tamaño

$n \times n$. Lo siguiente se aplica al bloque (i, j) th:

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial z_j}(z_1, \dots, z_s) = \frac{\partial}{\partial z_j}(z_i - h_n \sum_{k=1}^s a_{ik} f(t_{n-1} + c_k h_n, u_{n-1} + z_k)) \quad (1)$$

$$= \delta_{ij} I - h_n \sum_{k=1}^s a_{ik} \frac{\partial}{\partial z_j} f(t_{n-1} + c_k h_n, u_{n-1} + z_k) \quad (2)$$

$$= \delta_{ij} I - h_n a_{ij} \frac{\partial f}{\partial z_j}(t_{n-1} + c_j h_n, u_{n-1} + z_j) \quad (3)$$

$\frac{\partial f}{\partial z_j}$ obtenemos de la función `f_x` la clase de ecuación diferencial.

3.7.2. Pruebas de orden de coherencia con `void ordertest`

Esta función se puede utilizar para determinar el orden de consistencia de un método general de Runge-Kutta, cuya tabla Butcher se conoce. Para esto, sin embargo, es necesario encontrar la solución exacta en la función u en la clase de la ecuación diferencial para especificar. Se puede encontrar un ejemplo en el archivo `modelproblem.hh`. La cabecera funcional de `ordertest` se ve como esto:

```
template<class M, class S> void ordertest(const M&
model, S solver, Number T, Number h_0, int L)
```

Describe `model` una ecuación diferencial ordinaria `solver` es un solucionador y T es el punto en el tiempo que se utilizará para la prueba del orden de coherencia. h_0 es el tamaño del paso inicial y L es el número de veces que h_0 debe dividirse a la mitad en el cálculo. En la consola, el error en el i -ésimo paso y el orden de coherencia calculado con él se muestran en la i -ésima línea. Hay un breve ejemplo de aplicación en el archivo `model_ordertest.cc`.

Cálculo del orden de consistencia

- Para el orden de consistencia α es aplicable: $\|u - u_h\| = Ch^\alpha$
- $E_{n_1, n_2} = \frac{\|u(T) - u_{h_1}(T)\|}{\|u(T) - u_{h_2}(T)\|} = \frac{Ch_1^\alpha}{Ch_2^\alpha} = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^\alpha$, por lo cual $h_i = \frac{h_0}{2^i}$ porque es elegido.
- $\alpha = \frac{\log E_{n_1, n_2}}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}$
- En el caso de que T no se vea afectado directamente por un paso de tiempo, es decir, $u_{h_i}(T)$ no se calcula directamente, el algoritmo de cálculo debe adaptarse. Se hace una distinción entre varios casos. Si T casi se alcanza (distancia menor que el *epsilon* dado), se usa este valor, es decir, el último paso se incrementa en un máximo de *epsilon*, de modo que T se golpea exactamente. De lo contrario, cambie el tamaño del paso de los últimos uno o dos pasos para presionar T exactamente.

3.8. Ejemplos de aplicación

En la carpeta `examples/num1` Se dan algunos ejemplos de aplicación interesantes, en los que se puede ver cómo se utilizan los métodos de la conferencia en otras ciencias naturales.

3.8.1. Modelo de Hodgkin-Huxley

El modelo de Hodgkin-Huxley proviene de la neurobiología y describe los procesos en la membrana celular de una célula neural durante la transmisión de estímulos. Para obtener explicaciones más detalladas, consulte <https://de.wikipedia.org/wiki/Hodgkin-Huxley-Modell>.

3.8.2. Problema de los n-cuerpos

El problema de los n-cuerpos es un problema de astrofísica que se ocupa de los movimientos de los cuerpos celestes. Para obtener explicaciones más detalladas, consulte https://en.wikipedia.org/wiki/N-body_problem.

3.9. Oscilador de Van der Pol

Este es un ejemplo de vibración que en nuestro caso es un buen ejemplo de una ecuación diferencial rígida. Más detalles están disponibles en <https://de.wikipedia.org/wiki/Van-der-Pol-System> bei Wikipedia.

Apéndice A Pequeño curso de programación

Apéndice B Comandos de Unix

La siguiente tabla resume los comandos más importantes para el terminal (la ventana negra). Todas las palabras en mayúsculas son marcadores de posición.

Referencias