

Wissenschaftliches Programmieren für Ingenieure

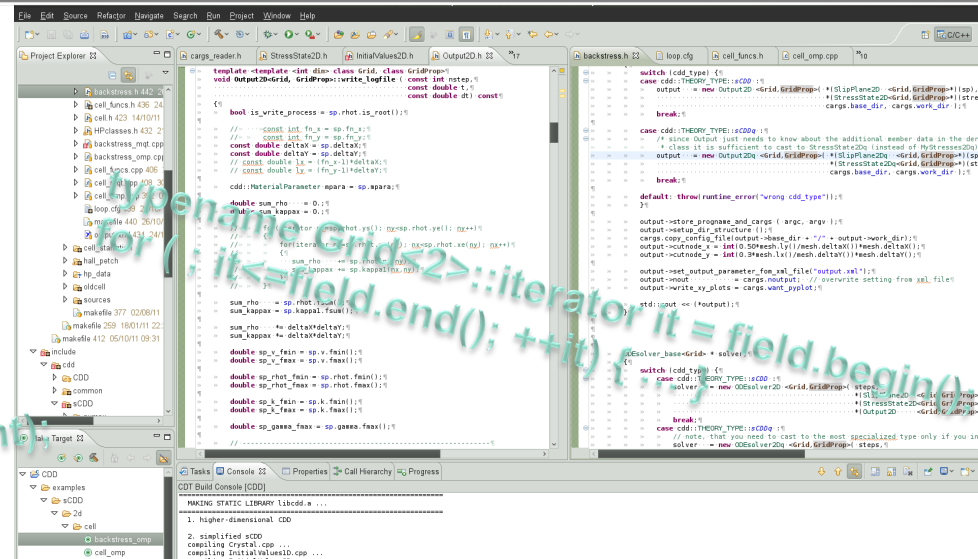
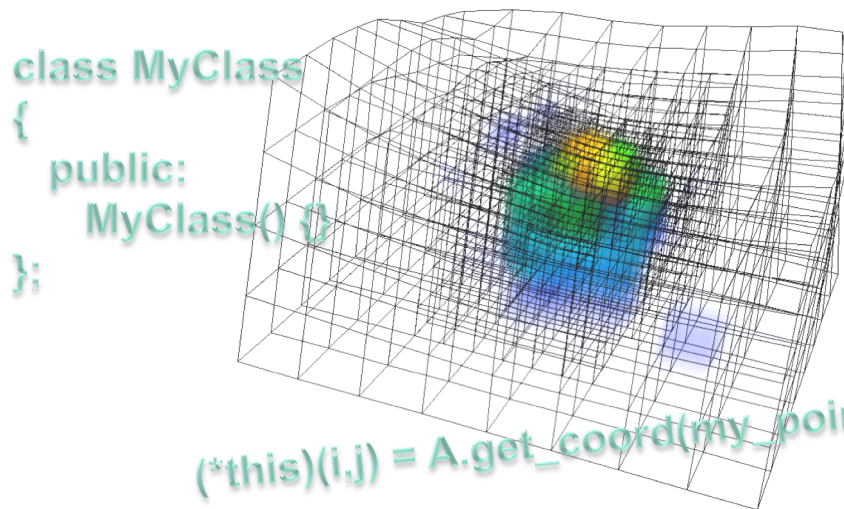
A. Trenkle, T.Achkar, Dr. M. Stricker Dr. D. Weygand

Übung 5: (~2 Termine)

Pointer und Felder; Klassen; Lineare Gleichungssysteme, Anwendung: das Wärmeleitproblem

Institute for Applied Materials – Computational Materials Science (IAM-CMS)

KIT – The Karlsruhe Institute of Technology – University of the State of Baden-Wuerttemberg, GERMANY



Gliederung der Übung

Info

In den letzten Übungen haben Sie die **Vector-/Matrix-Klassen** der **Eigen3** Bibliothek verwendet.

Sie werden heute:

1. Eigene Vector-/Matrix-Klassen schreiben bzw. erweitern
2. Dynamische Felder anlegen
3. Diese Klassen zum Lösen von linearen Gleichungssystemen verwenden
4. Das 1D-Wärmeleitproblem aus der Vorlesung lösen

0.1 Fehlersuche mit assert

Info

assert Bibliothek erleichtert die Fehlersuche

- Mit `assert` können Bedingungen überprüft werden, z.B. ob Variablen positiv sind etc.
- Nichterfüllen führt während der Ausführung des Programms zum Abbruch und eine Fehlermeldung wird ausgegeben
- Einbinden erfolgt über `#include <cassert>`
- Mit der Compileranweisung `NDEBUG` wird `assert` ignoriert

```
#include <iostream>
#include <cassert>

using namespace std;

int main(){

    int i;

    for (;;){
        cin >> i;
        assert(i!=0);
        cout<<"i="<<i<<endl;
    }

}
```

```
g++ main.cxx
./a.out
```

```
1
i=1
2
i=2
3
i=3
0
a.out: main.cxx:12: int main(): Assertion `i!=0' failed.
Aborted
```

```
g++ -DNDEBUG main.cxx
./a.out
```

```
1
i=1
2
i=2
3
i=3
4
i=4
0
i=0
1
i=1
```

1.1 Dynamische Felder

Info

Siehe auch Vorlesung ab S.109, **besonders S.112-116**

- **Erzeugen** eines eindimensionalen Felds:

- `int *a;`
- `a=new int[10];`

- **Löschen** eines eindimensionalen Felds:
`delete[] a;`

- **Erzeugen** eines zweidimensionalen Felds (3x5):

```
int **b;  
b = new int*[3];  
b[0]=new int[3*5];  
for (int i=1; i<3 ; i++)  
    b[i] = b[0]+i*5;
```

- **Löschen** eines zweidimensionalen Felds:
`delete[] b[0];`
`delete[] b;`

- **Zugriff:**

```
a[2] = 5; //Schreiben  
int i = a[1]; //Lesen
```

- **Zugriff:**

```
b[0][4] = 3; //Schreiben  
int i;  
i = b[2][3]; //Lesen
```

2. Klassen: Aufbau

Info










Siehe auch **Vorlesung ab S.179**

- In Klassen werden (eigene) Datentypen definiert
- Klassen beinhalten:
 - **Membervariablen**: Variablen, die notwendig sind, um die Aufgaben der Klasse umsetzen zu können
 - **Memberfunktionen**: Schnittstelle zur Verwendung der Klasse, wenn als public deklariert
 - **Operatoren**: klassenspezifisches Verhalten für „normale“ Operatoren wie +,-,*,=,(),...
 - **Konstruktoren**: deklarieren Membervariablen bei Erzeugung eines Objekts der Klasse
 - **Destruktor**: Löscht Membervariablen nach Ende des Gültigkeitsbereichs des Objekts
- Zugriffsrechte in Klassen:
 - **public**: für alle sichtbar, Schnittstelle der Klasse zur „Außenwelt“
 - **private**: nur für für Objekte der gleichen Klasse sichtbar, Variablen sollten immer private deklariert werden
 - **protected**: auch Objekte aus abgeleiteten Klassen haben Zugriff, hier nicht verwendet

Vector-/Matrix-Klassen

Todo

Machen Sie sich mit der Struktur einer einfachen Klasse vertraut

- Laden Sie von ILIAS ‘**vec_mat.tgz**’ herunter und entpacken sie es in einem Ordner /home/.../UB05/
- Erstellen Sie daraus in **Eclipse** ein neues **Makefile Projekt**
- In diesem Projekt werden die beiden Klassen **Vector** und **Matrix** implementiert
- Die Klasse **Vector** ist bereits ausreichend implementiert, öffnen Sie `vector_func.h` und `vector_func.cpp` und beantworten Sie folgende Fragen:
 - Aus welchen Membervariablen besteht die Klasse Vector? 
 -  Wie werden die Vektoreinträge gespeichert?
 - Welche Arten von Konstruktoren gibt es 
 -  Warum ist der Default-Konstruktor `Vector()`; auf `private` gesetzt? Wie kann man das noch und besser in c++11 realisieren?
 - Wie werden die Membervariablen im Konstruktor erzeugt? 
 -  Wie wird intern auf die Membervariablen zugegriffen?
 - Welche Aufgabe hat der Destruktor? 
 -  Welche Operatoren werden für Vector überladen?
 - Wie kann von außen auf die Membervariablen zugegriffen werden (lesen/schreiben)? 

Vector-Klasse: Konstruktor und Destruktor

Info

vector_funcs.h

```
class Vector { //Beginn der Vector Klasse
public:
    //Constructor
    Vector ( const std::size_t dim );
    //Copy-Constructor
    Vector( const Vector & c );
    //Destructor
    ~Vector ();
    ...

private:

    //Default Constructor: Hier PRIVATE
    //um Ausführen des Default Constructor zu
    //unterbinden
    Vector ();

    double * dataPtr; // pointer for
    data
    std::size_t N; // number
    of entries in the vector
```

Membervariablen:

- dataPtr zeigt auf das 1D-Feld
- N ist Größe des Vektors

vector_funcs.cpp

```
#include "vector_funcs.h"

using namespace std;
//Constructor
Vector::Vector ( const std::size_t dim ){
    this->N = dim;
    this->dataPtr = new double[dim];
};

//Copy-Constructor
Vector::Vector( const Vector & c ){
    this->N = c.N;
    this->dataPtr = new double[ this->N ];
    //kopiere komponentenweise den Vektor c
    for (std::size_t nx=0; nx<c.N; ++nx)
        this->dataPtr[ nx ] = c.dataPtr[ nx ];
};

//Destructor
Vector::~Vector (){
    delete [] this->dataPtr;
};
```

Zugriff:

- mit this-> können Membervariablen angesprochen werden
- this ist ein Pointer auf das aufrufende Objekt

Konstruktor:

- Größe des Vektors N festgelegt
- 1D Feld der Größe dim wird mit new angelegt

Copy-Konstruktor:

- Größe des Vektors N wird kopiert
- 1D Feld der Größe N wird angelegt
- Werte des Vektors c werden kopiert

Destruktor:

- alle mit new angelegten Objekte müssen explizit mit delete gelöscht werden!!!

Info

vector_funcs.h

```
//Return size of Vector  
const std::size_t size() const;
```

Memberfunktionen: Zugriff auf
Vector von außen

```
//Ausgabe aller Einträge  
void print(const std::string title="", const int w=8) const;  
//const int w=8 default Wert für Abstand. Übergabe bei Aufruf optional
```

```
//Copy Operator
```

```
Vector & operator= ( const Vector & c );
```

```
//Initialisierung mit Skalar
```

```
Vector & operator=(const double value);
```

```
//Index Operator Reading
```

```
const double operator() ( std::size_t n ) const;
```

```
//Index Operator Writing
```

```
double & operator() ( std::size_t n );
```

```
//Vektor-Addition
```

```
const Vector operator+ (const Vector & c2) const;
```

```
//Vektor-Subtraktion
```

```
const Vector operator- (const Vector & c2) const;
```

```
//Skalarprodukt
```

```
const double operator* (const Vector & c2) const;
```

```
//Multiplikation mit Skalar
```

```
const Vector operator* ( const double & lambda) const;
```

Operatoren:

Hier sind eine Reihe von gängigen Operatoren für die
Klasse Vector definiert

- Kopieren
- ...
- Lesen/Schreiben
- Vektor-Addition/Subtraktion
- Skalarprodukt
- Multiplikation mit Skalar c

Info

matrix_funcs.h: Aufbau und Schnittstellen

```
class Matrix {
public:
    //Constructor TODO: Selber machen
    Matrix (std::size_t const rows, std::size_t const cols);
    //Copy-Constructor TODO: Selber machen
    Matrix (const Matrix & m);
    //Destructor: TODO: Selber machen
    ~Matrix ();
    //Copy Operator
    Matrix & operator= ( const Matrix & m );
    //Fill with same Value
    Matrix & operator= ( const double val );
    //Index Operator Reading
    const double operator() ( const std::size_t nx, const std::size_t ny ) const;
    //Index Operator Writing TODO: Selber machen
    double & operator() ( const std::size_t nx, const std::size_t ny );
    //Matrix-Vector Produkt
    const Vector operator* ( const Vector & b ) const;
    //Matrix Addition TODO: Selber machen
    const Matrix operator+ ( const Matrix & A) const;
    const std::size_t rows() const;
    const std::size_t cols() const;
    //Ausgabe Matrix
    void print(const int w=8) const; //const int w=8 default Wert für Abstand. Übergabe bei Aufruf optional

private:
    //Default Constructor: Hier PRIVATE um des Ausführen default Constructor zu unterbinden
    Matrix ();
    double ** dataPtr;
    int _rows, _cols;
};
```

Konstruktoren & Destruktor:

- Müssen selbst implementiert werden (siehe nächste Folie)
- Regeln für dynamische Variablendeklaration beachten

Memberfunktionen & Operatoren:

- Methode zum Verändern einzelner Matriceinträge muss implementiert werden
- Addition zweier Matrizen muss ebenfalls implementiert werden


Membervariablen:

- dataPtr: Pointer für das 2D-Feld
- _rows, _cols ist Größe der Matrix

Matrix-Klasse

Todo

Ergänzen Sie die Matrix-Klasse

- In der Headerdatei **matrix_funcs.h** ist die Matrix-Klasse und ihr Schnittstellen definiert. Ergänzen Sie in **matrix_funcs.cpp** fehlenden Implementierungen:
 1. Konstruktor: Legen Sie ein 2D Feld **mit dynamischer Variablendeklaration** an
 2. Copy-Konstruktor: Kopieren der Werte eine vorhandenen Matrix
 3. Destruktor: Beachten Sie, dass jedes **new** im Konstruktor ein eigenes **delete** im Destruktor erfordert
 4. Operator () für die Matrixklasse: wodurch unterscheidet sich der Operator, der nur Lesen bzw. auch Schreiben erlaubt? Sind beide notwendig? 
 5. Implementieren Sie den Operator + für eine Matrix-Matrix Addition
 6. **Testen Sie die Funktionalitäten** der implementierten Methoden und Operatoren beider Klassen in **vec_mat_test.cpp** und überlegen Sie sich weitere Testfälle.

3. Lösen von linearen Gleichungssystemen

Info

Siehe auch Vorlesung

- Aus der Vorlesung kennen Sie Lösungsverfahren für lineare Gleichungssysteme (LGS)
- In dieser Übung werden der direkte **LU-Solver** und der iterative **CG-Solver** verwendet
- Für das Lösen von Gleichungssystemen benötigen Sie Vektoren und Matrizen, dafür haben Sie die beiden Klassen **Vector** und **Matrix** implementiert
- Für den GC-Solver benötigen Sie **symmetrische Matrizen**

Todo

Machen Sie sich mit den Solvern vertraut

- Laden Sie **solver.tgz** herunter, entpacken Sie es und legen in Eclipse ein neues Makefile Projekt an
- Kopieren Sie Ihre Lösungen für **vector_funcs.h/.cpp** und **matrix_funcs.h/.cpp** ebenfalls in den Ordner **solver**
- Testen Sie die Solver in **main_programm_solver.cpp**
- Mit der Methode **write_vector_to_file** können Sie die Lösungsvektoren in eine Datei schreiben

Anwendung: Das Wärmeleitproblem

Info

Siehe auch Vorlesung S. 150f

- Das 1D-Wärmeleitproblem aus der Vorlesung können Sie mit Hilfe der gegebenen Solver und der Vector-/Matrix-Klassen lösen
- Diskretisieren Sie das Problem mit Hilfe der **Finite Differenzen**
- Beachten Sie, dass Sie bei manchen iterativen Verfahren mit **symmetrischen Matrizen** arbeiten müssen; wenn Sie das LGS aufstellen, wird die Matrix zunächst **unsymmetrisch** sein
- Der Stab hat die Länge L
- Die Randbedingungen sind: T_0 (Temperatur am Anfang des Stabs), T_L (Temperatur am Ende des Stabs), T_e (Umgebungstemperatur)
- Der Wärmeleitkoeffizient ist k

Anwendung: Das Wärmeleitproblem

Todo

Lösen Sie das Wärmeleitproblem

- Erweitern Sie `main_programm_solver.cpp` so, dass Sie das Wärmeleitproblem lösen können.
- Als Rand-/Umgebungsbedingungen wählen Sie die Temperaturen T_0, T_L und T_e .
- Diskretisieren Sie das Problem mit M Stützstellen: T_i die Temperatur ab Stützstelle i .
- Das Gleichungssystem hat die Form $A_{ij}T_j = b_i$
- Durch **Anpassung der rechten Seite** (b_i) der Gleichung können Sie eine symmetrische Matrix erhalten:
 - Da $T(x=0) = T_0$ und $T(x=L) = T_M = T_L$ können Sie die Matrixeinträge A_{i0} und A_{iM} auf der rechten Seite b_i berücksichtigen.
 - **Stellen Sie das LGS zunächst für wenige Stützstellen „von Hand“ auf Papier auf und überlegen Sie sich die notwendigen Anpassungen der Matrix und rechten Seite der Gleichung!!**
- Lösen Sie das Gleichungssystem mit den mitgelieferten Solvern und lassen Sie sich die Lösungen in Dateien ausgeben.
- Variieren Sie die Parameter und plotten die Temperaturverläufe mit gnuplot.