

HDNUM

Heidelberger Numerikbibliothek

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

5. Mai 2024

Zusammenfassung

Die Heidelberger Numerikbibliothek wurde begleitend zu den Vorlesungen *Einführung in die Numerik* und *Numerik* in der Programmiersprache C++ entwickelt und stellt einfach zu benutzende Klassen für grundlegende Aufgaben in der Numerik bis hin zur Lösung von gewöhnlichen Differentialgleichungen zur Verfügung. In fast allen Klassen ist der benutzte Zahlentyp parametrisierbar so dass auch hochpräzise Rechnungen durchgeführt werden können.

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	2
1.1	Was ist HDNUM	2
1.2	Installation	3
2	Lineare Algebra	4
2.1	Vektoren	4
2.2	Matrizen	6
2.3	LR Zerlegung	8
2.3.1	Kurze Erklärung des Algorithmus	8
2.3.2	LR-Zerlegung - How to	8
2.4	Ausführliche Erläuterungen zur Datei <code>lr.hh</code>	9
2.5	Iterationsverfahren - die Datei <code>newton.hh</code>	11
2.5.1	Die Klasse <code>SquareRootProblem</code>	12
2.5.2	Die Klasse <code>Newton</code>	13
2.5.3	Ausführliche Erläuterungen zur Klasse <code>Newton</code>	14
2.5.4	Die Klasse <code>Banach</code>	14
2.5.5	Implementierung	14
2.6	QR Zerlegung mittels Gram-Schmidt Orthogonalisierung	17
2.6.1	Gram-Schmidt Verfahren	17
2.6.2	Kurze Einleitung zur QR-Zerlegung	17
2.6.3	QR-Zerlegung - Erklärung der Funktionen	17

3	Gewöhnliche Differentialgleichungen	19
3.1	Das Paradebeispiel für eine DGL in HDNUM - <code>modelproblem.hh</code>	19
3.2	Anwendungsbeispiel für <code>modelproblem.hh</code>	21
3.3	Der Solver löst die DGL - <code>modelproblem.cc</code>	21
3.4	Was muss ein Solver können? - <code>expliciteuler.hh</code>	22
3.5	Einschub: Gnuplot in <code>ode.hh</code>	23
3.6	Einschrittverfahren - <code>ode.hh</code>	24
3.6.1	Die Verfahren in <code>ode.hh</code>	24
3.7	Das allgemeine Runge-Kutta-Verfahren - <code>RungeKutta</code>	25
3.7.1	Bedienung der Klasse <code>RungeKutta</code>	25
3.7.2	Konsistenzordnungstests mit <code>void ordertest</code>	26
3.8	Anwendungsbeispiele	27
3.8.1	Hodgkin-Huxley-Modell	27
3.8.2	n-body Problem	27
3.9	Van der Pol Oszillator	27
	Appendices	27
	Anhang A Kleiner Programmierkurs	28
	Anhang B Unix Kommandos	28
	tocdepth5	

1 Einführung

1.1 Was ist HDNUM

Die Heidelberger Numerikbibliothek (HDNUM) ist eine C++-basierte Bibliothek zur Durchführung der praktischen Übungen zu den Vorlesungen *Einführung in die Numerik* und *Numerik (gewöhnlicher Differentialgleichungen)*. Die aktuelle Version ist unter

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

verfügbar und wird mit dem Versionskontrollsystem `git` verwaltet. Spezifische Versionen können auf der jeweiligen Vorlesungswebseite veröffentlicht werden.

Ziele bei der Entwicklung von HDNUM waren i) die einfache Benutzbarkeit (inklusive einfacher Installation), ii) die Demonstration objektorientierter Programmierung in der Numerik sowie die Möglichkeit zur Durchführung von Berechnungen mit beliebiger Genauigkeit auf Basis der Gnu Multiple Precision¹ Bibliothek. Derzeit bietet HDNUM die folgende Funktionalität:

- 1) Klassen für Matrizen und Vektoren
- 2) Lösung linearer Gleichungssystem
- 3) Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme
- 4) Lösung von Systemen gewöhnlicher Differentialgleichungen
- 5) Lösung der Poissongleichung mit Finiten Differenzen

¹<https://gmplib.org>

1.2 Installation

HDNUM ist eine „header only“ Bibliothek und erfordert keine Installation ausser dem Herunterladen der Dateien. Die aktuelle Version kann man mittels

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

herunterladen. Hierzu ist das Programm `git` erforderlich, welches für alle Betriebssysteme frei erhältlich ist. Alternativ wird üblicherweise auch ein komprimiertes `tar`-archive auf der Homepage der jeweiligen Vorlesung angeboten. Dies entpackt man mittels

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

In dem entpackten bzw. installiertem Verzeichnis findet man die folgenden Dateien und Unterverzeichnisse:

- `hdnum.hh`: Diese Header-Datei ist in ein C++-Programm einzubinden um HDNUM nutzen zu können.
- Das Verzeichnis `mystuff` ist für ihre Programme vorgesehen aber Sie können natürlich jedes andere Verzeichnis nutzen. Wichtig ist nur, dass der Compiler die Datei `hdnum.hh` findet. Im Verzeichnis `mystuff` ist schon ein Beispielprogramm um gleich loslegen zu können. Dieses Programm übersetzt man mit:

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

Diese Befehle setzen voraus, dass auf ihrem System der GNU C++-Compiler installiert ist. Unter Windows oder für andere Compiler müssen Sie die Befehle entsprechend anpassen.

- Das Verzeichnis `examples` im HDNUM-Ordner enthält viele Beispiele geordnet nach Programmierkurs, Numerik 0 und Numerik 1.
- Das Verzeichnis `src` im HDNUM-Ordner enthält den Quellcode der HDNUM Bibliothek. Diese Dateien werden von `hdnum.hh` eingebunden.
- Das Verzeichnis `programmierkurs` im HDNUM-Ordner enthält die Folien zum Programmierkurs.
- Das Verzeichnis `tutorial` im HDNUM-Ordner enthält den Quellcode für dieses Dokument.

GNU Multiple Precision Bibliothek

HDNUM kann Berechnungen mit hoher Genauigkeit durchführen. Hierzu ist die GNU Multiple Precision Bibliothek (GMP) erforderlich, welche Sie für viele Systeme kostenlos erhalten können. Um GMP nutzen zu können müssen Sie in der Datei `hdnum.hh` die Zeile

```
#define HDNUM_HAS_GMP 1
```

auskommentieren. Zusätzlich sind eventuell Compileroptionen notwendig damit der Compiler die Headerdateien und Bibliotheken von GMP findet. Dies kann dann so aussehen:

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

2 Lineare Algebra

2.1 Vektoren

`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 Euklidische Norm
 - 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 Elementen
hdnum::Vector<double> y(10,3.14);    // 10 Elemente initialisiert
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 fuer mpf_class
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, auch die Größe wird überschrieben!

```
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[7],...,x[9]
z = x.sub(3,4);           // z ist Kopie von x[3],...,x[6]
```

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; // schoene 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 fuer complex
std::cout <<mx << std::endl; // geht auch fuer mpf_class
```

Beispielausgabe

```
[ 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
```

Hilfsfunktionen

```
float d = norm(w);           // Euklidsche Norm
d = w.two_norm();           // das selbe
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;
}
```

- Verbesserte Version mit **Funktientemplate** und by-const-reference Übergabe

```

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;
}

```

- By-value Übergabe ist bei großen Objekten vorzuziehen

2.2 Matrizen

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 Matrix uninitialisiert
hdnum::DenseMatrix<float> C(10,10,0.0); // 10x10 Matrix 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, kopiert auch Größe mit

```

hdnum::DenseMatrix<float> A(B.rowsize(),B.colsize()); // korrekte Groesse
A = B; // kopieren

```

- Ausschnitte von Matrizen (Untermatrizen)

```

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

```

Rechnen mit Matrizen

- Vektorraumoperationen (Vorsicht: Matrizen sollten passende Größe haben!)

```
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
A.sc(x,1);           // mache x zur ersten Spalte von A
A.sr(x,1);           // mache x zur ersten Zeile von A
float d=A.norm_infty(); // Zeilensummennorm
d=A.norm_1();         // Spaltensummennorm
```

Ausgabe und Hilfsfunktionen

- Ausgabe von Matrizen

```
std::cout << A.sub(0,0,3,3) << std::endl; // öschne Ausgabe
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<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;
}
}

```

Im Folgenden geht es um Löser für Gleichungssysteme. Ist das zu lösende Gleichungssystem linear, so verwendet man eine LR- oder QR-Zerlegung. Im nichtlinearen Fall, der beispielsweise bei den in Numerik 1 behandelten impliziten Runge-Kutta Verfahren auftritt, macht man sich Fixpunktiterationen, wie z.B. im Newtonverfahren zunutze.

2.3 LR Zerlegung

2.3.1 Kurze Erklärung des Algorithmus

Die LR-Zerlegung wird angewandt, um ein Gleichungssystem der Form $Ax = b$ zu lösen. Dabei wird die reguläre, quadratische Matrix A in eine linke untere Dreiecksmatrix L und in eine rechte obere Dreiecksmatrix R zerlegt, sodass $A = LR$. Zusätzlich ist meistens eine Pivotisierung erforderlich, womit man schließlich auf das System $PA = LR$ kommt. Durch diese Pivotisierung ist sichergestellt, dass das Diagonalelement der Matrix ungleich null ist, denn sonst könnten wir unseren Algorithmus nicht anwenden.

Dabei unterscheidet man zum einen die Partialpivotisierung, bei der sichergestellt wird, dass das betragsmäßig größte Element der Spalte unterhalb der Diagonale durch Zeilenpermutationen auf die Diagonale getauscht wird. Bei der Totalpivotisierung betrachtet man die ganze Matrix unterhalb der Diagonalen und sucht dort das betragsmäßig größte Element, um es durch Zeilen- und Spaltenoperationen auf den aktuellen Diagonaleintrag zu tauschen. Das betragsmäßig größte Element wird gewählt, um numerische Fehler zu verringern.

2.3.2 LR-Zerlegung - How to

Will man ein Programm schreiben, das ein lineares Gleichungssystem der Form $Ax = b$ mittels LR-Zerlegung der Matrix A löst, ist wie folgt vorzugehen:

- Zu Beginn erstellt man den Rechenseitevektor b und die Matrix A . Dies sieht zum Beispiel so aus:

```

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;

```

- Zusätzlich benötigen wir Vektoren x und p . Falls eine Totalpivotisierung durchgeführt wird, ist ein weiterer Vektor q zu erstellen. Um die Kondition der Matrix zu verbessern können die Funktionen `row_equilibrate` sowie `apply_equilibrate` angewendet werden, für die ein zusätzlicher Vektor s benötigt wird:

```

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

```


- Wie bereits im vorangegangenen Punkt erwähnt, kann zu Beginn die Kondition der Matrix A verbessert werden. Dies geschieht mithilfe der Funktionen `row_equilibrate` und `apply_equilibrate`. Wie diese angewendet werden, kann man in den nachfolgenden Punkten sehen.
- Nun wendet man eine der folgenden Funktionen auf die Matrix A und den zuvor erstellten Permutationsvektor p an. In unserem Beispiel führen wir eine Totalpivotisierung durch, weshalb wir den zusätzlichen Vektor q benötigen:

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

Für eine Partialpivotisierung ist die Funktion `lr_partialpivot`, für eine LR-Zerlegung ohne Pivotisierung die Funktion `lr` zu verwenden. (Hierbei ist der zusätzliche Permutationsvektor q nicht notwendig.) Jetzt können wir das Gleichungssystem für viele unterschiedliche rechte Seiten lösen.

- Dafür müssen wir die rechte Seite wie folgt vorbereiten:

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

- Daraufhin rufen wir die Funktion `solveL` auf, die als Parameter die Matrix A , den Rechteseitevektor b und einen Vektor y bekommt, in dem die Lösung des Gleichungssystems $Ly = b$ gespeichert wird. Um Speicherplatz zu sparen können wir das Ergebnis gleich in den bereits vorhandenen Vektor b schreiben.
- Schließlich wird noch die Funktion `solveR` benötigt, die das Gleichungssystem $Rx = y$ löst. Die Funktion braucht als Parameter die Matrix A , den Rechteseitevektor y (des Gleichungssystems $Ly = b$) sowie den Vektor x , in dem das endgültige Ergebnis gespeichert wird:

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

- Falls eine Totalpivotisierung vorgenommen wurde, müssen zum Schluss die Permutationen, die im Vektor q (Spaltentransformationen von A) gespeichert wurden, auf das Ergebnis x mittels `permute_backward` angewendet werden:
- Die Lösung des linearen Gleichungssystems ist nun im Vektor x gespeichert. In unserem Fall:

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

2.4 Ausführliche Erläuterungen zur Datei `lr.hh`

- **Die Funktion `lr`:** Zu Beginn wird bei allen Funktionen überprüft, ob eine quadratische, nichtleere Matrix vorliegt und ob der Vektor p mit der gegebenen Matrix kompatibel ist. In der ersten *for*-Schleife wird eine Zeile der Matrix gesucht, deren Diagonalelement ungleich null ist. Anschließend wird diese Zeile mit der des aktuellen Diagonalelements getauscht. Die Permutationen, welche durch die Pivotsuche entstehen, werden im Vektor p gespeichert.

```

for (std::size_t k=0; k<A.rowsize()-1; ++k)
{
    // finde Pivotelement und vertausche Reihen
    for (std::size_t r=k; r<A.rowsize(); ++r)
        if (A[r][k]!=0)
        {
            p[k] = r; // speichere Permutation im Schritt k
            if (r>k) //tausche komplette Reihe falls 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");
    // Modifikation
    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];
    }
}

```

In der zweiten *for*-Schleife wird dann die obere Dreiecksmatrix mit dem permutierten A erstellt.

- **Die Funktion `lr_partialpivot`:** Parameter: Matrix A sowie Permutationsvektor p . Diese Funktion führt eine partielle Pivotisierung durch. Dabei geht sie wie folgt vor: Zunächst wird der Vektor p initialisiert, indem er mit den Werten 0 bis $n - 1$ (wobei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$) beschrieben wird. Danach wird in der Matrix A das Pivotelement (betragsmäßig größte Element) in der aktuellen Spalte unterhalb des Diagonalelementes gesucht und die erforderliche Permutation um dieses auf die Diagonale zu tauschen im Vektor p gespeichert:

```

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; // speichert Permutation im Schritt k
}

```

In der darauffolgenden Schleife werden die Zeilen k und j getauscht, sodass das Pivotelement auf der Diagonalen liegt.

- **Die Funktion `lr_fullpivot`:** Diese Funktion geht ähnlich wie die Funktion `lr_partialpivot` vor, allerdings braucht sie einen zusätzlichen Vektor q , um eine Totalpivotisierung durchzuführen. Hierbei sind nicht nur Zeilen- sondern auch Spaltenvertauschungen möglich, welche im Vektor q gespeichert werden.
- **Die Funktion `permute_forward`:** Der Vektor p hat die notwendigen Permutationen gespeichert. In dieser Funktion werden die Zeilenpermutationen auf den Vektor b übertragen:

```

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;
}

```

- **Die Funktion permute_backward:** Diese Funktion wird am Ende der Lr-Zerlegung angewendet, um die in der Funktion permute_forward vorgenommenen Permutationen beim Rechenseitevektor wieder rückgängig zu machen.
- **Die Funktion row_equilibrate:** Diese Funktion wird vor dem eigentlichen Algorithmus angewendet, um die Kondition der Matrix zu verbessern (Equilibration). Die Werte, durch die die Zeilen der Matrix dividiert werden, sind im Vektor s gespeichert:

```

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];
}

```

- **Die Funktion apply_equilibrate:** Die Veränderungen, die an der Matrix A durchgeführt wurden, werden hier ebenfalls auf den Vektor b angewandt, um die Lösung nicht zu verfälschen.
- **Die Funktion solveL:** Parameter: Vektor x und Rechenseitevektor b . Diese Funktion löst die Gleichung $Lx = b$. Dabei wird x folgendermaßen, iterativ bestimmt: $x_i = b_i - \sum_{j=0}^{i-1} l_{ij}x_j$

```

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;
}

```

- **Die Funktion solver:** Diese Funktion löst die Gleichung $Rx = b$. Dabei wird x folgendermaßen bestimmt: $x_i = b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} r_{ij}x_j$ (hierbei ist $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

```

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 Iterationsverfahren - die Datei newton.hh

Jetzt wissen wir, wie wir lineare Gleichungssysteme der Form $Ax = b$ lösen können. Was ist jedoch zu tun, wenn das Gleichungssystem nicht linear ist, z.B. im simplen, eindimensionalen Fall $x^2 = a$? In der Vorlesung lernt man Verfahren, die sich Fixpunktiterationen zunutze

machen, um der Lösung sehr nahe zu kommen. Die Datei `newton.hh` stellt hilfreiche Werkzeuge bereit, um derartige Gleichungen und Gleichungssysteme zu lösen. Das Wichtigste ist das Newtonverfahren, mit dem man nichtlineare Gleichungen der Form $F(x) = 0$ lösen kann. Zunächst betrachten wir jedoch die konkrete Formulierung eines Problems in einer Klasse.

2.5.1 Die Klasse SquareRootProblem

Um ein nichtlineares Gleichungssystem der Form $f(x) = 0$ lösen zu können müssen wir zu Beginn eine Klasse für unser Problem erstellen. Diese benötigt neben einem geeigneten Konstruktor und den Angaben über die Dimension des Problems eine Methode, die den Funktionswert bereitstellt, und eine andere, welche die Ableitung der Funktion bereitstellt. Wir zeigen dies beispielhaft an der Klasse `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;
```

Bei den Typedefs am Anfang handelt es sich zwar nicht um Methoden, diese sind jedoch ebenso wichtig. Wir wissen von vornherein nicht, welcher Datentyp letztlich verwendet wird. Die Typedefs sind da, damit der Solver später erkennen kann, mit welchem Zahlentyp die Klasse eigentlich arbeitet.

- Konstruktor:

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

Damit haben wir die Möglichkeit unterschiedliche Probleme der Form $x^2 = a$ zu lösen, indem wir dem Konstruktor das gewünschte a übergeben.

- Dimension:

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

- Funktionswert: $f(x) = x^2 - a$:

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

Wir benötigen diese spezielle Form, da wir nur Probleme der Form $f(x) = 0$ lösen können.

- Ableitung: $f'(x) = 2x$:

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

(Die Ableitung muss manuell berechnet werden.)

Nachdem wir unsere Problemklasse erstellt haben, können wir nun ein Objekt dieser Klasse z.B. das Problem $x^2 = 5$ erstellen und dieses mit dem Newtonalgorithmus lösen. Dazu gehen wir wie folgt vor:

- Objekt der Klasse `WurzelProblem` mit dem Namen „problem“ erstellen, welches die Gleichung $x^2 = 5$ repräsentiert:

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

Nun müssen wir ein Objekt der Klasse `Newton` erstellen und diverse Parameter setzen:

2.5.2 Die Klasse `Newton`

- Folgendermaßen kann man eine Instanz der Klasse `Newton` erstellen und alle Parameter setzen:

```
Newton newton; // Ein Newtonobjekt
newton.set_maxit(20); // maximale Anzahl der Iteratioenen
newton.set_verbosity(2); // Ausfuehrlichkeit der Ausgaben
newton.set_reduction(1e-100); // Reduktionsfaktor
newton.set_abslimit(1e-100); // maximaler absoluter Fehler
newton.set_linesearchsteps(3); // Wie viele Schritte fuer Linesearch
```

- Schließlich benötigen wir noch einen Vektor u , in dem die Lösung gespeichert wird. Dieser muss die selbe Größe wie unser Problem haben:

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

- Den Startwert für das Newton Verfahren setzten wir hier auf 17. Es kann natürlich auch ein anderer Wert gewählt werden, man muss allerdings beachten, dass der Startwert nicht zu weit von der Lösung entfernt ist, da das Newton-Verfahren nicht global konvergent ist.

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

- Jetzt können wir die Methode `solve` der Klasse `Newton` auf unser Problem anwenden:

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

- Wir bekommen als Lösung dieses speziellen Wurzelproblems das Ergebnis:
 $u = 2.2361e + 00$

Man kann solche Probleme nicht nur mit dem Newton-Verfahren lösen, wie bereits gesehen, sondern auch mittels der Klasse `Banach`.

2.5.3 Ausführliche Erläuterungen zur Klasse Newton

Die Klasse Newton besteht im Wesentlichen aus einer Methode `solve` welche zum Lösen von nichtlinearen Gleichungen benutzt werden kann. Neben dieser Methode gibt es noch einige Verfahrens-Parameter wie die maximale Iterationsanzahl, welche im Konstruktor gesetzt werden können.

Beim Lösen wird zuerst überprüft ob das Residuum $r = F(x)$ bereits kleiner oder gleich der Schranke `abslimit` ist. Ist dies der Fall, so ist der Startwert bereits gut genug und wir sind fertig. Im anderen Fall wird mittels der LR-Zerlegung die nächste Suchrichtung $\nabla f(x_k)^{-1}f(x_k) = z_k$ bestimmt. Mittels einer simplen Line-Search Methode wird ein geeignetes λ bestimmt und $x_{k+1} = x_k - \lambda z_k$ gesetzt.

```
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));              // berechnet Norm
}
if (newR<(1.0-0.25*lambda)*R)    // pruefe Konvergenz
{
    x = y;
    R = newR;
    break;
}
else lambda *= 0.5;              // reduziert Daempfungsfaktor
if (R<=reduction*R0)           // pruefe Konvergenz
{
    converged = true;
    return;
}
```

2.5.4 Die Klasse Banach

- Löst ein nichtlineares System der Form $F(x) = 0$ mittels Fixpunktiteration $x = x - \sigma * F(x)$
- Die wichtigste Funktion ist die Funktion `solve`, die die eigentliche Lösung durchführt.
- Bei diesem Verfahren macht man sich den banachschen Fixpunktsatz zunutze.
- Eine konkrete Implementierung, wie ein Problem mit der Klasse `Banach` gelöst wird ist nicht in dieser Dokumentation enthalten, da dies sehr ähnlich zur Lösung mit der Klasse `Newton` funktioniert. Ein Beispiel sieht man in der Datei `wurzelbanach.cc`. Der einzige Unterschied besteht im Verfahrensparameter `sigma`, den man bei `Banach` noch zusätzlich beachten muss.

2.5.5 Implementierung

```
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;
};

```

- Mit folgender Typdefinition spart man sich Schreibarbeit und es ist klarer, dass damit eine Größe gemeint ist.

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

- Im Konstruktor werden allen privaten Parametern der Klasse Werte zugewiesen,...

```

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

```

- ...die man dann mit den folgenden Funktionen nachträglich noch ändern kann. Der Parameter „maxit“ sorgt dafür, dass der später noch erläuterte Solver in keine Endlosschleife gerät, falls die Fixpunktiteration nicht konvergiert, sondern in diesem Fall abbricht und meldet, dass keine Konvergenz vorliegt.

```

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

```

- Hier legt man den Verfahrensparameter σ fest.

```

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

```

- Wie viele Schritte soll der Solver machen, bevor er abbricht? Die kann man hier festlegen.

```

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

```

- Ausgabekontrolle: Je höher die gesetzte Zahl ist, desto genauere Informationen zur Konvergenz werden auf der Konsole ausgegeben. Was die einzelnen Zahlen bedeuten sollte man sich allerdings bei Bedarf im Quellcode ansehen.

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

- Fehlertoleranz

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

- Reduktionsfaktor

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

- Mit der Methode solve kann dann ein gegebenes Model unter Rückgriff auf die 'private Members' gelöst werden.

```
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());           // Residuum
    Vector<N> y(model.size());           // temporaere Loesungen

    model.F(x,r);                        // berechne das nichtlineare Residuum
    N RO(norm(r));                        // Norm des Anfangsresiduums
    N R(RO);                              // Norm des aktuellen Residuums

    converged = false;

    // maximal so viele Iterationen wie in Matrix festgelegt sind
    for (size_type i=1; i<=maxit; i++)
    {
        if (R<=abslimit)                 //pruefe Absolutbetrag des Residuums
        {
            converged = true;
            return;
        }
    }
}
```

Falls das vorläufige Ergebnis noch nicht genau genug war (\leq *abslimit*), geht es in die nächste Iteration, bei der zunächst der eigentliche Iterationsschritt ausgeführt wird und anschließend mittels Norm getestet wird, ob das Ergebnis nun genau genug ist und man anschließend wieder zum Beginn der for-Schleife springt. Ist das Ergebnis genau genug, hat die Funktion ihren Zweck erfüllt und wird beendet.

```
    // next iterate
    y = x;
    y.update(-sigma,r);                  // y = x-sigma*z
    model.F(y,r);                        // r = F(y)
    N newR(norm(r));                      // Norm berechnen

    x = y;                                // Annahme der neuen Iterierten
    R = newR;                             // Normspeicherung

    // check convergence
    if (R<=reduction*RO || R<=abslimit)
```



```

    {
        converged = true;
        return;
    }
}

```

- Der bool-Wert, den folgende Funktion zurück gibt, wird am Anfang immer auf false gesetzt. Löst die Funktion `solve` das Gleichungssystem erfolgreich, so setzt sie den Wert auf true und als private Member der Klasse bleibt dieser Wert dann auch erhalten. Somit sagt einem diese Funktion, ob das Fixpunktverfahren schon mal erfolgreich war und damit auch wieder erfolgreich sein wird.

```

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

```

2.6 QR Zerlegung mittels Gram-Schmidt Orthogonalisierung

2.6.1 Gram-Schmidt Verfahren

Das Orthogonalisierungsverfahren von Gram-Schmidt wird verwendet um eine Orthonormalbasis Q von $\text{Bild}(A)$ zu berechnen. Die dabei entstandene Matrix erfüllt die Eigenschaft $Q^T * Q = I$ bzw. $Q^T = Q^{-1}$. Zur Berechnung dieser stehen in HDNUM zwei Varianten zur Verfügung:

```

DenseMatrix<number> A(3, 3);
A(0, 0) = 1; A(0, 1) = 2;
A(1, 0) = 1; A(1, 1) = 3;

DenseMatrix<number> Q1(gram_schmidt(A))
DenseMatrix<number> Q2(modified_gram_schmidt(A))

```

Der `modified_gram_schmidt` Algorithmus besitzt dabei den Vorteil, dass er nicht so anfällig für Rundungsfehler ist, wie der `gram_schmidt` Algorithmus. Dies spielt besonders bei Matrizen mit einer hohen Konditionszahl eine Rolle.

2.6.2 Kurze Einleitung zur QR-Zerlegung

Die QR-Zerlegung wird angewandt um A in eine Orthonormalbasis Q und eine rechte obere Dreiecksmatrix R zu zerlegen, sodass gilt: $A = Q * R$. Bei Matrizen, die mehr Spalten als Zeilen aufweisen, oder keinen vollen numerischen Rang haben, ist zusätzlich eine Pivottisierung mit Spaltentauschen notwendig. Diese wirkt darüber hinaus auch rank-revealing, kann also benutzt werden um den Rang einer Matrix zu bestimmen. Bei dieser gilt dann: $A * P = Q * R$, wobei P eine Permutationsmatrix ist.

2.6.3 QR-Zerlegung - Erklärung der Funktionen

Die einfache Zerlegung ohne Pivottisierung kann folgendermaßen in einem Programm umgesetzt werden:

- Zu Beginn erstellt man die Matrix A die zerlegt werden soll und speichert sie ab, da diese im Laufe der Zerlegung überschrieben wird:

```

DenseMatrix<number> A(3, 3);
A(0, 0) = 1; A(0, 1) = 2; A(0, 2) = 3;
A(1, 0) = 1; A(1, 1) = 3; A(1, 2) = -5;

```

```
A(2, 0) = 2; A(2, 1) = 4; A(2, 2) = 19;
```

```
DenseMatrix<number> Q(A);
```

- Die Zerlegungsfunktion gibt die Matrix R als Rückgabewert zurück, am besten fängt man diesen mit dem copy constructor der DenseMatrix ab. Dabei sind die Funktionen `qr_gram_schmidt` und `qr_gram_schmidt_simple` nahezu identisch. Da `qr_gram_schmidt_simple` am Anfang jedoch die übergebene Matrix abspeichert, während `qr_gram_schmidt` rein in-place arbeitet, ist `qr_gram_schmidt` immer priorisiert zu verwenden. Da die Matrix während der Funktion überschrieben wird, sollte sie davor abgespeichert werden:

```
DenseMatrix<number> Q1(A);
```

```
DenseMatrix<number> Q2(A);
```

```
DenseMatrix<number> R1(qr_gram_schmidt(Q1));
```

```
DenseMatrix<number> R2(qr_gram_schmidt(Q2));
```

Nun sind die beiden Matrizen Q und R erstellt, aus ihnen kann man sich einfach die Matrix A wieder zurückrechnen:

```
DenseMatrix<number> A1(Q1*R1);
```

```
DenseMatrix<number> A2(Q2*R2);
```

- Die Zerlegung mittels Pivotisierung akzeptiert alle Typen von Matrizen, ein Beispiel mit $n > m$ und keinem vollen Rang wäre:

```
DenseMatrix<number> A(3, 4);
```

```
A(0, 0) = 1; A(0, 1) = 2; A(0, 2) = 3; A(0, 3) = 4;
```

```
A(1, 0) = -5; A(1, 1) = 9; A(1, 2) = 2; A(1, 3) = 5;
```

```
A(2, 0) = 3; A(2, 1) = -9; A(2, 2) = 12; A(2, 3) = -22
```

- Ergänzend wird eine Variable um den Rang abzuspeichern und ein Permutationsvektor benötigt. Zudem ist es sinnvoll wieder die Matrix A abzuspeichern, da diese im Laufe der Funktion überschrieben wird:

```
DenseMatrix<number> Q(A);
```

```
int rank;
```

```
Vector<int> p(A.colsize());
```

- Wie bei den anderen Varianten wird Matrix R zurückgegeben:

```
DenseMatrix<number> R(qr_gram_schmidt_pivoting(Q, p, rank));
```

- Hat Matrix A keinen vollen Rang verändert sich bei der Zerlegung die Dimension von Q und R , in solch einem Fall müssen diese noch nachträglich modifiziert werden:

```
DenseMatrix<number> Q_right_dimension(A.rowsize(), rank);
```

```
DenseMatrix<number> R_right_dimension(rank, A.colsize());
```

```
for (int i = 0; i < Q_right_dimension.rowsize(); i++) {  
    for (int j = 0; j < Q_right_dimension.colsize(); j++) {  
        Q_right_dimension(i, j) = Q(i, j);  
    }  
}  
for (int i = 0; i < R_right_dimension.rowsize(); i++) {  
    for (int j = 0; j < R_right_dimension.colsize(); j++) {  
        R_right_dimension(i, j) = R(i, j);  
    }  
}
```

- Aus diesen kann die Ursprungsmatrix A zurückgerechnet werden:

```
DenseMatrix<number> QR(Q_right_dimension*R_right_dimension);
```

- Durch die Pivotisierung während der Funktion hat QR aber noch vertauschte Spalten, mit Hilfe des Permutationsvektors können diese aber zurückgetauscht werden:

```
permute_forward(QR, p);
```

3 Gewöhnliche Differentialgleichungen

Im folgenden Kapitel soll es um das zentrale Thema der Vorlesung Numerik 1 gehen, das Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen. Zur Wiederholung: das ist eine Gleichung bei der eine Funktion, sowie auch Ableitungen der Funktion vorkommen und man versucht herauszufinden, welche Funktion die Gleichung erfüllt. HDNUM stellt einige hilfreiche Werkzeuge zum Lösen von solchen Differentialgleichungen zur Verfügung. Es zeigt, wie eine Differentialgleichung aufzubereiten ist, damit sie ein Solver (wie die im einzelnen Funktionieren sei der Vorlesung und ihren Beweisen überlassen) lösen kann und beinhaltet zugleich mehrere solcher Solver. Fakt ist, dass sowohl Differentialgleichungen, als auch Solver in Klassen verpackt sind. Diese Klassen müssen bestimmte Methoden haben, damit sie untereinander kompatibel sind. Fangen wir doch einmal mit einem Beispiel für eine Differentialgleichung an:

3.1 Das Paradebeispiel für eine DGL in HDNUM - modelproblem.hh

- Diese Datei beinhaltet lediglich die Klasse `ModelProblem`, welche genau die Methoden enthält, die für die Kompatibilität mit jedem Solver aus HDNUM nötig sind. Also muss jede Differentialgleichungsklasse genau diese Methodendeklarationen aufweisen!
- Die komplette Information über eine Differentialgleichung ist in der Implementierung der Methoden enthalten.
- Die Datei ist so geschrieben, dass Objekte der Klasse `ModelProblem` Modelprobleme im Sinne der Vorlesung sind, kann aber für jede beliebige Differentialgleichung umgeschrieben werden. Dabei ist zu beachten, dass alle Funktionsköpfe der Methoden nicht verändert werden. Nur so bleibt die neue DGL mit unseren Solvern kompatibel.
- Ein Objekt der Klasse `Modelproblem` entspricht dann einer zu lösenden Differentialgleichung.
- Ist die Datei im Header eingebunden, kann man im Programm Objekte der Klasse `Modelproblem` erstellen und mit dem Wissen der nächsten Abschnitte dann auch lösen.

```
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, hdnun::Vector<N>& x0) const; //Anfangswerte
void f (const T& t, const hdnun::Vector<N>& x,      //Funktion f
       hdnun::Vector<N>& result) const;
void f_x (const T& t, const hdnun::Vector<N>& x,    //Jacobi Matrix von f
         hdnun::DenseMatrix<N>& result) const;

private:
    N lambda;
};

```

- Bei den Typedefs am Anfang handelt es sich zwar nicht um Methoden, diese sind jedoch auch eine kurze Erklärung wert. Man sieht daran gut, dass es sich um eine Template-Klasse handelt und nie von vornherein klar ist, welcher Datentyp dann eigentlich verwendet wird. Die Typedefs sind da, damit der Solver später erkennen kann, mit welchem Zahlentyp die Modellklasse eigentlich arbeitet. Wir verwenden sie, damit uns die Möglichkeit bleibt, mit sehr genauen Datentypen (multiple precision) zu arbeiten.

- Der Konstruktor initialisiert falls benötigt private Parameter. Solche muss es aber nicht immer geben.

```

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

```

- Mit dieser Funktion legt man fest, welche Dimension die zu lösende Differentialgleichung hat.

```

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

```

- Hier legt man die Anfangswerte fest. t_0 ist der zeitliche Anfangswert, während x_0 der Vektor der Anfangswerte ist. Im eindimensionalen enthält er also nur einen Eintrag.

```

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

```

- Die Funktion `f` beinhaltet die eigentliche Differentialgleichung. Dabei wird der Vektor `result`, also die Lösung der Funktion `f` zum Zeitpunkt `t` berechnet.

```

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

```

- Diese Funktion stellt die Jacobi-Matrix der Funktion `f` in `result` zur Verfügung. Diese wird von impliziten Solvern benötigt.

```

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;
}

```

- Im privaten Teil der Klasse stehen eventuell benötigte Parameter.

3.2 Anwendungsbeispiel für modelproblem.hh

Die Datei `modelproblem_high_dim.hh` ist eine Umformulierung der Datei `modelproblem.hh` und stellt die Differentialgleichung $u'(t) = \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -2 & 5 \end{pmatrix} * u(t)$ mit Anfangswert $u(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}$ da. Damit ist sie ein Beispiel für die Darstellung einer mehrdimensionalen Differentialgleichung.

3.3 Der Solver löst die DGL - modelproblem.cc

- Diese Datei ist ein Musterbeispiel zum Lösen von gewöhnlichen Differentialgleichungen.
- Sie zeigt, wie man Differentialgleichungsklasse und Solverklasse so kombiniert, dass die Differentialgleichung gelöst und das Ergebnis derart in eine Datei geschrieben wird, dass man es plotten kann.

```

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

```

Im Header wird neben Bibliotheken auch das Modelproblem, sowie eine Datei zur Lösung der Differentialgleichung eingebunden. In diesem Fall soll die Differentialgleichung mit dem expliziten Euler gelöst werden.

```

int main ()
{
    typedef double Number; // Definiert Zahlentyp
    typedef ModelProblem<Number> Model; // Definiert Modeltyp
    Model model(-1.0); // Objekt der Klasse mit lambda=-1
    typedef ExplicitEuler<Model> Solver; // Waehle einen Solver
    Solver solver(model); // initialisiere Solver mit Model
    solver.set_dt(0.02); // Setze Zeitabstaende
    hdnum::Vector<Number> times; // Vektor fuer Zeitabstaende
    hdnum::Vector<hdnum::Vector<Number>> states; // Loesungsvektor
    times.push_back(solver.get_time()); // Anfangszeit in Vektor speichern
    states.push_back(solver.get_state()); // Anfangswert in Vektor speichern
    while (solver.get_time()<5.0-1e-6) // Schleife zum Loesen
    {
        solver.step();
        times.push_back(solver.get_time()); // Zeit speichern
        states.push_back(solver.get_state()); // Wert speichern
    }

    gnuplot("mp2-ee-0.02.dat",times,states); // Ausgabe wird im Abschnitt
                                           // ueber Gnuplot erklart
}

```

```

return 0;
}

```

Ein Alternativbeispiel ist die Datei `modelproblem_high_dim.cc`. Indem man beim Solver EE durch andere Solver aus `ode.hh` (Erklärung siehe unten) ersetzt, kann man die DGL mit verschiedenen Mitteln lösen und sieht dabei gleich ein Beispiel, dass eine DGL mit allen unseren Solvern kompatibel ist.

3.4 Was muss ein Solver können? - `explicitEuler.hh`

- Diese Datei enthält die Klasse `ExplicitEuler`.
- In der Klasse gibt es alle Methoden, die ein Solver in unserem Kontext braucht.
- Alle Solver haben mindestens die Methoden, die `ExplicitEuler` hat, eventuell noch ein paar mehr.
- Mit Hilfe dieser Datei kann man alle Differentialgleichungen lösen, die die bereits erwähnte Darstellung in einer Klasse besitzen.

```

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
};

```

- Zuerst noch eine kurze Bemerkung zu den Typedefs am Anfang: Der Solver hat zuanächst im Konstruktor nur eine Referenz auf ein Model bekommen. Damit ist aber noch nicht klar, mit welchen Zahlentypen im Model gearbeitet wird und ob man die Funktionen davon aufrufen kann. Um dies festzusetzen dienen die Typedefs. Somit kann der Solver DGLs für beliebige Zahlentypen lösen und erst beim Kompilieren wird festgelegt, welcher eigentlich gemeint ist.
- Der Konstruktor speichert eine Referenz zu dem Model, das er lösen soll. Außerdem werden hier Parameter für den Lösungsalgorithmus wie die Größe der Zeitschritte, Anfangswerte, oder ähnliches festgelegt.

```

template<class M>
ExplicitEuler::ExplicitEuler (const M& model_)
    : model(model_), u(model.size()), f(model.size())

```

```
{
  model.initialize(t,u);
  dt = 0.1;
}
```

- Da Solver die Lösung (Zeit-)Schritt für (Zeit-)Schritt berechnen, kann man festlegen, wie groß diese Schritte sein sollen. Je größer die Schritte, desto ungenauer das Ergebnis, aber desto geringer der Rechenaufwand.

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

- Der eigentliche Lösungsalgorithmus steht in der Funktion step. Sie entscheidet, wie man vom einem zum nächsten Schritt gelangt. Hier steht also der Algorithmus des expliziten Eulers.

```
template<class M>
void ExplicitEuler::step ()
{
  model.f(t,u,f); // berechnet Wert von f an der Stelle t
  u.update(dt,f); // naechster Funktionswert ist alter Wert+dt*f(t)
  t += dt; // die Zeit wird um dt nach vorne gesetzt
}
```

- Der bisher errechnete Lösungsvektor:

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

- Der Zeitpunkt, der gerade berechnet wurde:

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

- Das aktuelle dt (Schrittweite):

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

3.5 Einschub: Gnuplot in ode.hh

Ein numerischer Solver kann uns natürlich keine analytische Lösung einer DGL in Form einer konkreten Funktion liefern. Er kann uns aber sagen, wie die Lösungsfunktion an ganz vielen Punkten aussieht. Damit wir mit diesen vielen Zahltupeln etwas anfangen können, visualisieren wir sie mit Gnuplot. Folgende Template-Funktionen machen uns dies sehr leicht und schreiben das Ergebnis im richtigen Format in eine Datei, sodass wir es dann direkt plotten können.

1.

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

Nur für eindimensionale DGL geeignet! Man übergibt der Funktion einen Dateinamen (.dat) in Anführungsstrichen, sowie Zeit und Lösungsvektor. Die Funktion sorgt dafür, dass die Daten in einer Art Tabelle in einer Datei mit dem gewünschten Namen stehen. Diese Datei kann man dann plotten.

2.

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

Für zweidimensionale DGL geeignet! Man übergibt der Funktion die gleichen Daten wie oben und zusätzlich noch den zweiten Lösungsvektor. Das Ergebnis ist ebenfalls analog. Man beachte beim plotten dann allerdings die Eigenheiten der Mehrdimensionalität.

Als Beispielvorlage kann der Code im vorhergehenden Abschnitt am Ende gesehen werden.

Die wichtigsten Gnuplotbefehle im Terminal:

1. `gnuplot` - öffnet Gnuplot
2. `plot 'dateiname.dat'using 1:2` - plottet im zweidimensionalen unter Verwendung der Zeilen eins und zwei
3. `plot 'dateiname.dat'using 1:2, 'dateiname.dat'using 1:3` - plottet im zweidimensionalen zwei Graphen
4. `splot 'dateiname.dat'using 1:2:3` - plottet im dreidimensionalen
5. `exit` - beendet gnuplot

3.6 Einschrittverfahren - ode.hh

Nachdem wir uns jetzt angeschaut haben, wie genau eine Differentialgleichung und ein Solver in eine Klasse verpackt werden müssen, damit sie untereinander kompatibel sind und wie man mit dem Solver dann die Differentialgleichung löst, können wir dazu übergehen uns mehrere solcher Solver anzuschauen. In der Vorlesung lernt man dazu die impliziten und expliziten Runge-Kutta Verfahren als wichtigste Beispiele kennen. Der explizite Euler den wir zuvor schon als Beispiel hatten gehört auch dazu. In der Datei `ode.hh` sind mehrere solche Solver implementiert. Damit man eine beliebige Differentialgleichung (natürlich wieder in einer Klasse verpackt) mit jedem Solver lösen kann, haben diese Solverklassen alle Methoden mit den jeweils gleichen Funktionsköpfen. Lediglich in der Art wie diese Funktionen dann implementiert sind unterscheiden sie sich, was dann das einzelne Verfahren ausmacht. Zusätzlich zu den Methoden der zuvor behandelten Klasse `ExplicitEuler` haben die Klassen in `ode.hh` noch einige zusätzliche Funktionen. Die Verfahren mit Schrittweitensteuerung sind ebenfalls leicht abgewandelt.

3.6.1 Die Verfahren in ode.hh

- Explizite Runge-Kutta Verfahren
 - `EE` - expliziter Euler
 - `ModifiedEuler`

- Heun2
- Heun3
- Kutta3
- RungeKutta4
- Implizite Runge-Kutta Verfahren
 - IE - impliziter Euler
 - DIRK - Diagonal implizites Verfahren
- Schrittweitensteuerung
 - RKF45
 - RE - Richardsonextrapolation

3.7 Das allgemeine Runge-Kutta-Verfahren - RungeKutta

Diese Klasse ist dazu gebaut, um eine Differentialgleichung mit einem beliebigen expliziten oder impliziten Runge-Kutta-Verfahren zu lösen. Die Differentialgleichung muss dabei auf die gleiche Weise wie bisher in einer Klasse implementiert sein.

3.7.1 Bedienung der Klasse RungeKutta

Der einzige Unterschied zur Handhabung einer anderen Solverklasse besteht darin, dass dem Konstruktor zusätzlich noch das Butcher-Tableau des gewünschten Verfahrens übergeben werden muss. Der Funktionskopf im Namespace `hdnum` sieht folgendermaßen aus:

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

Die Matrix `A_` und die Vektoren `b_` und `c_` kommen direkt aus dem Butcher Tableau. Alles Weitere ist dann analog zu den anderen Solverklassen. `N` ist ein Templateparameter der Klasse. Möchte man statt dem Newtonverfahren das Banachverfahren zur Lösung von nichtlinearen Gleichungssystemen verwenden, so ist `Banach` ein zweiter Templateparameter den man beim Erzeugen eines Objektes davor schreibt. In diesem Fall macht es auch Sinn dem Konstruktor als weiteres Argument am Schluss noch einen *number_type sigma_* zu übergeben. Der entsprechende Konstruktor ist implementiert. Das könnte dann folgendermaßen aussehen:

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

Dabei müsste dann `model` ein Modelproblem vom Typ `Model` sein und `A` eine $n \times n$ Matrix, sowie `b` und `c` n -dimensionale Vektoren. Das `Sigma` im Banachverfahren wäre in diesem Fall dann `0,5`.

Die Algorithmen hinter Funktion `void step`

- Die Funktion `step` unterscheidet von Anfang an, ob es sich um ein explizites oder implizites Verfahren handelt. (Die Testfunktion erkennt dies am Butchertableau).
- Im expliziten Fall sind alle Werte bekannt und in privaten Variablen gespeichert, um $u_n^h = u_{n-1}^h + h_n(b_1 k_1 + \dots + b_s k_s)$ mittels $k_1 = f(t_{n-1}, u_{n-1}^h)$, $k_i = f(t_{n-1} + c_i h_n, u_{n-1}^h + h_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} k_j)$ zu berechnen. Dabei wird die Funktion f von der Problemklasse bereitgestellt

- Im impliziten Fall gilt es $k_i = f(t_{n-1} + c_i h_n, u_{n-i}^h + h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j)$ für $i = 1, \dots, s$ zu lösen und damit $u_n^h = u_{n-1}^h + h_n \sum_{i=1}^s b_i k_i$ zu bestimmen. Numerisch ist es jedoch einfacher, zunächst $z_i := h_n \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j$ für $i = 1, \dots, s$ zu berechnen und dann die k_i über $K = h_n^{-1} A^{-1} Z$ zu bestimmen. Dabei sind K und Z Vektoren aus Vektoren.

Falls b^T gleich der letzten Zeile von A ist, kann man sich die Berechnung der k_i sparen und direkt $u_n^h = u_{n-1}^h + z_s$ berechnen. Die nichtlinearen Gleichungssysteme bei der Berechnung der z_i werden wahlweise mit dem Banach- oder Newtonverfahren gelöst, für die eine Problemklasse erstellt wird.

- Sowohl für das Banach- als auch für das Newtonverfahren benötigt man eine bestimmte Problemklasse, die das zu lösende Problem modelliert. In unserem Fall erfüllt diesen Zweck die Klasse `ImplicitRungeKuttaStepProblem`. Diese wird im Konstruktor mit allen wichtigen Größen der Klasse `RungeKutta` initialisiert. Wichtig zu wissen ist jedoch, dass Banach- und Newtonverfahren keine Nullstellen von Funktionen, die Vektoren von Vektoren als Argument haben, berechnen können. Deshalb muss man Z als einen Vektor der Größe $n * s$ auffassen und erst danach wieder auf s Vektoren der Größe n zurückrechnen.
- Das Herzstück der Klasse `ImplicitRungeKuttaStepProblem` sind die Funktionen `void F` und `void F_x`. In der ersten wird die Funktion modelliert, die annulliert wird, wenn die richtigen z_i getroffen sind, während die zweite Funktion nur im Newtonverfahren benötigt wird und die Jacobimatrix der ersten Funktion bereitstellt.
- Die Funktion `F` sieht dabei folgendermaßen aus:

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

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

- Die zu berechnende Jacobimatrix ist eine Blockmatrix aus $s \times s$ Blöcken der Größe $n \times n$. Dabei gilt für den (i, j) -ten Block:

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

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

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

$\frac{\partial f}{\partial z_j}$ erhalten wir dabei aus der Funktion `f_x` der Differentialgleichungsklasse.

3.7.2 Konsistenzordnungstests mit void ordertest

Mit dieser Funktion kann man die Konsistenzordnung eines allgemeinen Runge-Kutta-Verfahrens, dessen Butchertableau man kennt, bestimmen. Dazu ist es jedoch nötig, in der Klasse der Differentialgleichung die exakte Lösung in der eine Funktion `u` anzugeben. Ein Beispiel dazu findet man in der Datei `modelproblem.hh`. Der Funktionskopf von `ordertest` sieht folgendermaßen aus:

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

Dabei beschreibt `model` eine gewöhnliche Differentialgleichung, `solver` ist ein Löser und `T` der Zeitpunkt, der für den Konsistenzordnungstest verwendet werden soll. h_0 ist die initiale Schrittweite und `L` die Anzahl, wie oft h_0 bei der Berechnung halbiert werden soll. Auf der Konsole wird dann in der i -ten Zeile der Fehler im i -ten Schritt, sowie die damit berechnete Konsistenzordnung ausgegeben. Ein kurzes Anwendungsbeispiel gibt es in der Datei `model_ordertest.cc`.

Berechnung der Konsistenzordnung

- Für die Konsistenzordnung α gilt: $\|u - u_h\| = Ch^\alpha$
- $E_{n_1, n_2} = \frac{\|u(T) - u_{h_1}(T)\|}{\|u(T) - u_{h_2}(T)\|} = \frac{Ch_1^\alpha}{Ch_2^\alpha} = \left(\frac{h_1}{h_2}\right)^\alpha$, wobei $h_i = \frac{h_0}{2^i}$ gewählt wird.
- $\alpha = \frac{\log E_{n_1, n_2}}{\log\left(\frac{h_1}{h_2}\right)}$
- Im Fall, dass `T` nicht direkt von einem Zeitschritt getroffen wird, also $u_{h_i}(T)$ nicht direkt berechnet wird, muss man den Berechnungsalgorithmus anpassen. Dabei unterscheidet man mehrere Fälle. Wird `T` fast getroffen (Abstand kleiner als vorgegebenes ϵ), so nimmt man diesen Wert, das heißt man vergrößert den letzten Schritt um maximal ϵ , sodass man `T` genau trifft. Andernfalls verändert man die Schrittweite der letzten ein oder zwei Schritte um `T` genau zu treffen.

3.8 Anwendungsbeispiele

Im Ordner `examples/num1` sind einige interessante Anwendungsbeispiele gegeben, bei denen man sehen kann, wie die Verfahren aus der Vorlesung in anderen Naturwissenschaften verwendet werden.

3.8.1 Hodgkin-Huxley-Modell

Das Hodgkin-Huxley-Modell kommt aus der Neurobiologie und beschreibt die Vorgänge an der Zellmembran einer Neuronen-Zelle bei der Reizweiterleitung. Für genauere Erklärungen siehe <https://de.wikipedia.org/wiki/Hodgkin-Huxley-Modell>.

3.8.2 n-body Problem

Das n-body Problem ist ein Problem der Astrophysik, bei dem es um die Bewegungen von Himmelskörpern geht. Für genauere Erklärungen siehe https://en.wikipedia.org/wiki/N-body_problem.

3.9 Van der Pol Oszillator

Dabei handelt es sich um ein Schwingungsbeispiel, das in unserem Fall ein gutes Beispiel für eine steife Differentialgleichung ist. Genaueres dazu gibt es unter <https://de.wikipedia.org/wiki/Van-der-Pol-System> bei Wikipedia.

Anhang A Kleiner Programmierkurs

Anhang B Unix Kommandos

In der folgenden Tabelle sind die wichtigsten Kommandos fürs Terminal (das schwarze Fenster) zusammengestellt. Alle Worte in Großbuchstaben sind Platzhalter.

Kommando	Auswirkungen
cd	gehe ins home-Verzeichnis
cd ORDNERNAME	gehe in einen Ordner, dieser muss im Ordner enthalten sein, in dem man sich gerade befindet
cd ..	gehe einen Ordner höher
ls	zeigt an, was sich in dem Ordner befindet, in dem man gerade ist
tar cvf GEWÜNSCHTERNAME.tar Inhalt1.cc Inhalt2.cc ... Inhaltn.cc	erstellt ein Tar-Archiv
tar xvf TARNAME.tar	entpackt das Tar
g++ -std=c++11 -o DATEINAME DATEINAME.cc	kompilieren (-std=c++11 braucht nicht jeder)
./DATEI	Ausführen der Datei

Literatur