Utrecht, 22 april 2013

# Modellen en Simulatie


**Gerard Sleijpen**

**Universiteit Utrecht**

*Department of Mathematics*


http://www.staff.science.uu.nl/~sleij101/

**Gerard** Sleijpen

Kamer 504, FG (voorheen WG)
Tel: 030-2531732
G.L.G.Sleijpen@uu.nl

http://www.staff.science.uu.nl/~sleij101/

>Lectures>Modellen en Simulatie, WISB 134

For referencies, cursusmateriaal,
achtergrondinformatie,. . .

Blackboard

Ori Yudilevich    Nina Rosa
Roy Wang    Judith Stoef, Bas te Kolste

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Onderzoeksmethodiek

**Fysische werkelijkheid**
(zekere geïdealiseerd aspect)

$\Downarrow$ **Modelleren** Fysica, Wiskunde,. . .

**Wiskundig model (fysisch model)**
(vaak differentie– of differentiaalverg.)

$\Downarrow$

**Computer model**

$\Downarrow$ **Wiskunde**
Calculus, Computational Science

$\Downarrow$ **Simuleren**

**Voorspellingen** $\Rightarrow$ voorspellen, beleid **Toepassingen**

$\Downarrow$ Metingen, Statistiek

**Fysische werkelijkheid**

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Modelleren

- bepaald deelaspect van de werkelijkheid
- vereenvoudigen voor
  1) beter begrip
  2) gemakkelijk toegankelijk voor analyse
  3) sneller rekenen
- alleen geldig in een bepaalde range van de parameters
- wiskundig beschrijven
- wiskundige resultaten interpreteren

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Simulatie

Gebruik het wiskundig model om scenario's door te rekenen (al dan niet met behulp van een computer)

(scenario's: wat gebeurt er als je een beginsituatie verandert, . . . ).

**Nut**. ontwerp, beleid, inzicht

**Inzicht.** Simulaties leveren geen eenduidig inzicht. Ondersteuning door wiskundige analyse is noodzakelijk.

**Wiskunde staat centraal** in dit college

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Wiskunde in context

In dit college:

- model begrijpen
- resultaten kunnen interpreteren
- (zeer) eenvoudige modellen kunnen maken

**Wiskunde staat centraal**:

- bekende wiskunde toepassen
- nieuwe (toepassingsgerichte) wiskunde ontwikkelen

# Wiskunde & Modelleren

Wiskunde speelt een rol

I. bij het opstellen van het model,

II. bij het analyseren van de oplossing,

III. bij het ontwerpen van het numeriek oplosproces.

Wiskunde levert

(i) globale uitspraken,
(ii) abstracte rekentechnieken,
(iii) numerieke rekentechnieken.

# Wiskunde levert...

**Voorbeeld**. $F(x) = a\,x^2 + b\,x + c$,
met $a$, $b$, $c$ gegeven reële getallen

**Wat te zeggen over $\lambda$ waarvoor $F(\lambda) = 0$?**

# Wiskunde levert. . .

**Voorbeeld**. $F(x) = a\,x^2 + b\,x + c$,
met $a$, $b$, $c$ gegeven reële getallen

**Wat te zeggen over $\lambda$ waarvoor $F(\lambda) = 0$?**

**Globale uitspraken** óf twee verschillende oplossingen $\lambda_1$, $\lambda_2$ in $\mathbb{C}$,
óf een oplossing $\lambda$ & $F(\lambda) = F'(\lambda) = 0$.

oplossing(en) reëel als $b^2 - 4ac \geq 0$.
als $\lambda_1 \notin \mathbb{R}$ dan $\lambda_2 = \overline{\lambda_1}$.

**Abstracte rekent.** $\lambda_{1,2} = \dfrac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$.

**Numerieke rekent.** $x_{n+1} = x_n - \dfrac{F(x_n)}{F'(x_n)}$ dan $x_n \to \lambda$
mits $\lambda$ reëel en $x_0$ goed gekozen

# Wiskundige analyse strategie

- eenvoudige voorbeelden goed begrijpen
- moeilijkere problemen ‘reduceren’ tot de eenvoudigere
  - niet-lineaire problemen benaderen door lineaire
  - hoger dimensionale problemen benaderen door 1-dimensionale
  - ...

**Voorbeeld**. Stel $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ is een gladde functie en

$$f(\alpha) = 0 \quad \text{voor 'n} \quad \alpha \in (a,b).$$

*Hoe $\alpha$ te berekenen?*

**Voorbeeld**. Stel $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ is een gladde functie en

$$f(\alpha) = 0 \;\text{ voor 'n }\; \alpha \in (a,b).$$

*Hoe $\alpha$ te berekenen?*

- Gok een waarde $x_0$. Schrijf $\alpha = x_0 + h$. Hopelijk is $h$ klein.

  $$0 = f(\alpha) = f(x_0 + h) = f(x_0) + h\, f'(x_0) + \tfrac{1}{2} h^2 f''(x_0) + \ldots$$

- Benader met het 'lineaire deel':

  $$0 = f(x_0) + h_0 f'(x_0)$$

  Met $h_0 = -\frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$ is hopelijk $\alpha = x_0 + h \approx x_0 + h_0$.

- Als met $x_1 \equiv x_0 + h_0$ geldt $f(x_1) \not\approx 0$, herhaal de procedure.

# Taylor reeks

Als $f$ $k+1$ maal continue differentieerbaar is in de buurt van $x_0$, dan

$$f(x_0+h) = f(x_0)+hf'(x_0)+\frac{h^2}{2!}f''(x_0)+\ldots+\frac{h^k}{k!}f^{(k)}(x_0)+R$$

De **restterm** $R$ voldoet aan

$$R = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}f^{(k+1)}(\xi)$$

voor zekere $\xi$ tussen $x_0$ en $x_0+h$.

# Newton

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

# hoger dim. problemen benaderen door 1-dim.

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{met} \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{met} \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Bereken de **eigenwaarden** en bijbehorende **eigenvectoren**:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \text{en} \quad \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_2$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{met} \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Bereken de **eigenwaarden** en bijbehorende **eigenvectoren**:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \text{en} \quad \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_2$$

Als $\mathbf{v}_1$ en $\mathbf{v}_2$ lineair onafhankelijk zijn, dan

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 \ \text{ en } \ \mathbf{y} = \beta_1 \mathbf{v}_1 + \beta_2 \mathbf{v}_2,$$

zekere scalairen $\alpha_i$ en $\beta_i$.

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{met} \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Bereken de **eigenwaarden** en bijbehorende **eigenvectoren**:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \text{en} \quad \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_2$$

Als $\mathbf{v}_1$ en $\mathbf{v}_2$ lineair onafhankelijk zijn, dan

$$\mathbf{x} = \alpha_1\mathbf{v}_1 + \alpha_2\mathbf{v}_2 \ \text{ en } \ \mathbf{y} = \beta_1\mathbf{v}_1 + \beta_2\mathbf{v}_2,$$

zekere scalairen $\alpha_i$ en $\beta_i$.

$$\text{Dus} \qquad \begin{aligned} \mathbf{y} &= \beta_1\mathbf{v}_1 + \beta_2\mathbf{v}_2 = \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}(\alpha_1\mathbf{v}_1 + \alpha_2\mathbf{v}_2) \\ &= \alpha_1\mathbf{A}\mathbf{v}_1 + \alpha_2\mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \alpha_1\lambda_1\mathbf{v}_1 + \alpha_2\lambda_2\mathbf{v}_2 \end{aligned}$$

en we zien dat

$$\beta_1 = \lambda_1\alpha_1 \quad \text{en} \quad \beta_2 = \lambda_2\alpha_2.$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} \quad \text{met} \quad \mathbf{A} \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \equiv \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{y} \equiv \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

Bereken de **eigenwaarden** en bijbehorende **eigenvectoren**:

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_1 = \lambda_1 \mathbf{v}_1 \quad \text{en} \quad \mathbf{A}\mathbf{v}_2 = \lambda_2 \mathbf{v}_2$$

Als $\mathbf{v}_1$ en $\mathbf{v}_2$ lineair onafhankelijk zijn, dan

$$\mathbf{x} = \alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 \ \text{ en } \ \mathbf{y} = \beta_1 \mathbf{v}_1 + \beta_2 \mathbf{v}_2,$$

zekere scalairen $\alpha_i$ en $\beta_i$: $\qquad \beta_1 = \lambda_1 \alpha_1, \quad \beta_2 = \lambda_2 \alpha_2.$

**Toepassingen**. $\qquad \mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{A}\mathbf{x}_n \ \Leftrightarrow$
met $\mathbf{x}_n = \alpha_1(n)\mathbf{v}_1 + \alpha_2(n)\mathbf{v}_2$ is $\alpha_i(n) = \lambda_i^n \alpha_i(0) \ \ (i = 1, 2)$

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) \ \Leftrightarrow$$
met $\mathbf{x}(t) = \alpha_1(t)\mathbf{v}_1 + \alpha_2(t)\mathbf{v}_2$ is $\alpha_i'(t) = \lambda_i \alpha_i(t) \ \ (i = 1, 2)$

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie

# Voorkennis

## Infi

- Differentiëren
- Integreren
- Taylorreeks
- Complexe getallen

## Lineaire Algebra

- Gauss eliminatie (vegen van kolommen)
- eigenwaarden en eigenvectoren

## Mathematica

# Complexe getallen

$\lambda = a + ib \in \mathbb{C}$ dan is $a = \mathrm{Re}(\lambda)$ en $b = \mathrm{Im}(\lambda)$.

$$a + ib = r\, e^{i\phi}, \quad a = \tfrac{1}{2}(\lambda + \bar{\lambda}), \quad b = \tfrac{1}{2i}(\lambda - \bar{\lambda})$$

voor $r = \sqrt{a^2 + b^2} = |\lambda| \geq 0$ en

$\phi \in [0, 2\pi)$ zodat $a = r\cos(\phi),\ b = r\sin(\phi)$ $\quad (\tan(\phi) = \frac{b}{a})$

**Voorbeeld**.

$f(t) = e^{i\,\nu\,t}$. Dan $f'(t) = i\,\nu\,e^{i\,\nu\,t} = i\,\nu\,f(t)$

Als $g(t) = \cos(\nu\,t)$, dan $g = \mathrm{Re}(f)$ en

$g'(t) = -\nu\sin(\nu\,t) = \mathrm{Re}(f'(t)) = \mathrm{Re}(i\,\nu\,e^{i\nu\,t}))$

# Complexe getallen

$\lambda = a + ib \in \mathbb{C}$ dan is $a = \mathrm{Re}(\lambda)$ en $b = \mathrm{Im}(\lambda)$.

$$a + ib = r\, e^{i\phi}, \qquad a = \tfrac{1}{2}(\lambda + \bar{\lambda}), \qquad b = \tfrac{1}{2i}(\lambda - \bar{\lambda})$$

voor $\quad r = \sqrt{a^2 + b^2} = |\lambda| \geq 0 \qquad$ en

$\phi \in [0, 2\pi)$ zodat $a = r\cos(\phi),\ b = r\sin(\phi) \qquad (\tan(\phi) = \frac{b}{a})$

$\lambda, \zeta \in \mathbb{C}$. $\quad$ Dan $\quad \overline{\lambda\zeta} = \bar{\lambda}\,\bar{\zeta}, \qquad \overline{\lambda + \zeta} = \bar{\lambda} + \bar{\zeta}$

$a, b \in \mathbb{R}, \quad \lambda = r\, e^{i\phi} \in \mathbb{C}$. $\quad$ Dan

$$\mathrm{Re}(\lambda(a + ib)) = r\cos(\phi)\, a - r\sin(\phi)\, b.$$

$\alpha, \beta, a, b \in \mathbb{R}$. $\quad$ Dan

$$\alpha a - \beta b = \mathrm{Re}(\gamma z) \quad \text{voor} \quad \gamma \equiv \alpha + i\beta, \qquad z \equiv a + ib$$

# Program

- Onderzoeksmethodiek
- Modelleren
- Simuleren
- Wiskunde
- Voorkennis
- Organisatie