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

Onderzoeksmethodiek

Fysische werkelijkheid
(zekere geïdealiseerd aspect)

⇓ **Modelleren** Fysica, Wiskunde,. . .

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

⇓

Computer model ⇓ **Wiskunde**
Calculus, Computational Science

⇓ **Simuleren**

Voorspellingen ⇒ voorspellen, beleid **Toepassingen**

⇓ Metingen, Statistiek

Fysische werkelijkheid

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

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

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 λ waarvoor $F(\lambda) = 0$?

Globale uitspraken óf twee verschillende oplossingen λ_1, λ_2 in $\mathbb{C}$,
óf een oplossing λ & $F(\lambda) = F'(\lambda) = 0$.

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 λ 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
  - . . .

niet-lineaire problemen benaderen door lineaire

Voorbeeld. Stel $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ is een gladde functie en $f(\alpha) = 0$ voor 'n $\alpha \in (a, b)$.

Hoe α te berekenen?

- Gok een waarde x_0. Schrijf $\alpha = x_0 + h$. Hopelijk is h klein.
  $0 = f(\alpha) = f(x_0 + h) = f(x_0) + h\,f'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) + \ldots$
- 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

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

De **restterm** R voldoet aan

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

voor zekere ξ 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.

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

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

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

zekere scalairen α_i en β_i: $\quad \beta_1 = \lambda_1 \alpha_1, \quad \beta_2 = \lambda_2 \alpha_2.$

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

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{A}\mathbf{x}(t) \quad \Leftrightarrow$$

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

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

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

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

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

Voorkennis

Infi

- Differentiëren
- Integreren
- Taylorreeks
- Complexe getallen

Lineaire Algebra

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

Mathematica