

# Modelleren, Simuleren en Continue Wiskunde

Dick van Albada  
Jose Lagerberg

Webpages op BlackBoard: <http://blackboard.ic.uva.nl/>

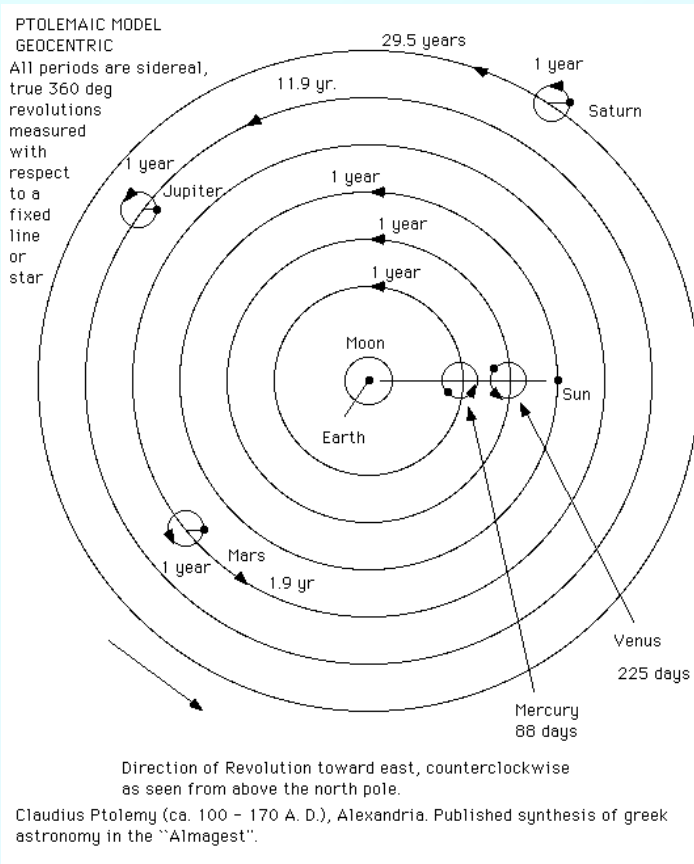
Inleiding

# Doel van het college

- De computer als gereedschap voor modelberekeningen
- Zijn sterkten
- Zijn zwakten
- Hoe en wanneer je hem gebruikt
  - En wanneer niet

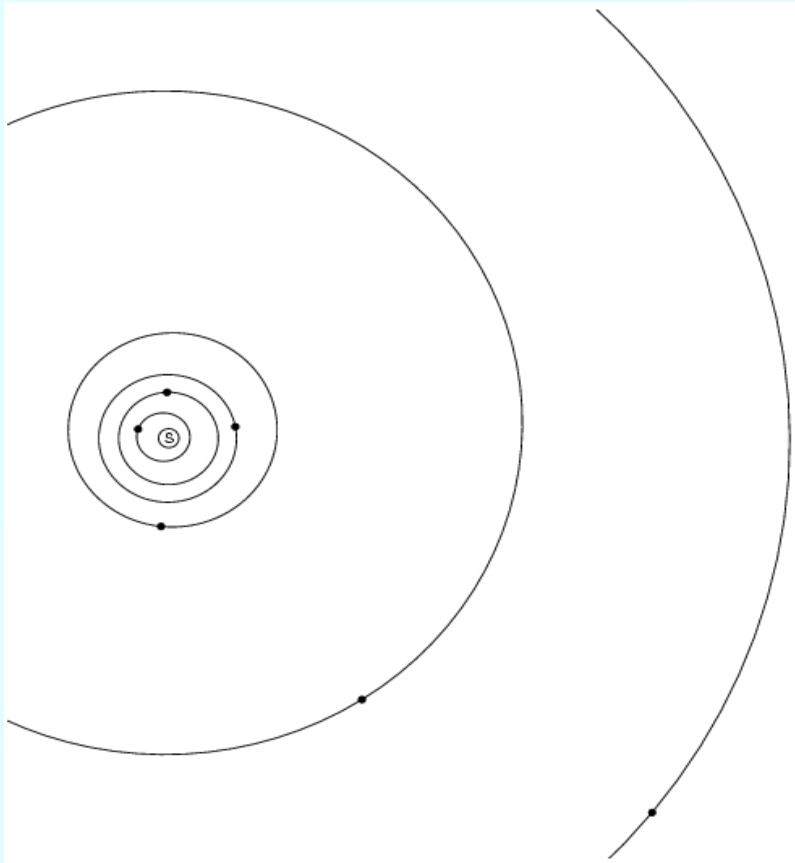
# **MODELLEN EN SIMULATIES**

# Een model van het zonnestelsel (Ptolemeus)



- Geocentrisch
- Dit model geeft redelijk goede voorspellingen
- Paste goed in het wereldbeeld

# Een ander model (Kepler)

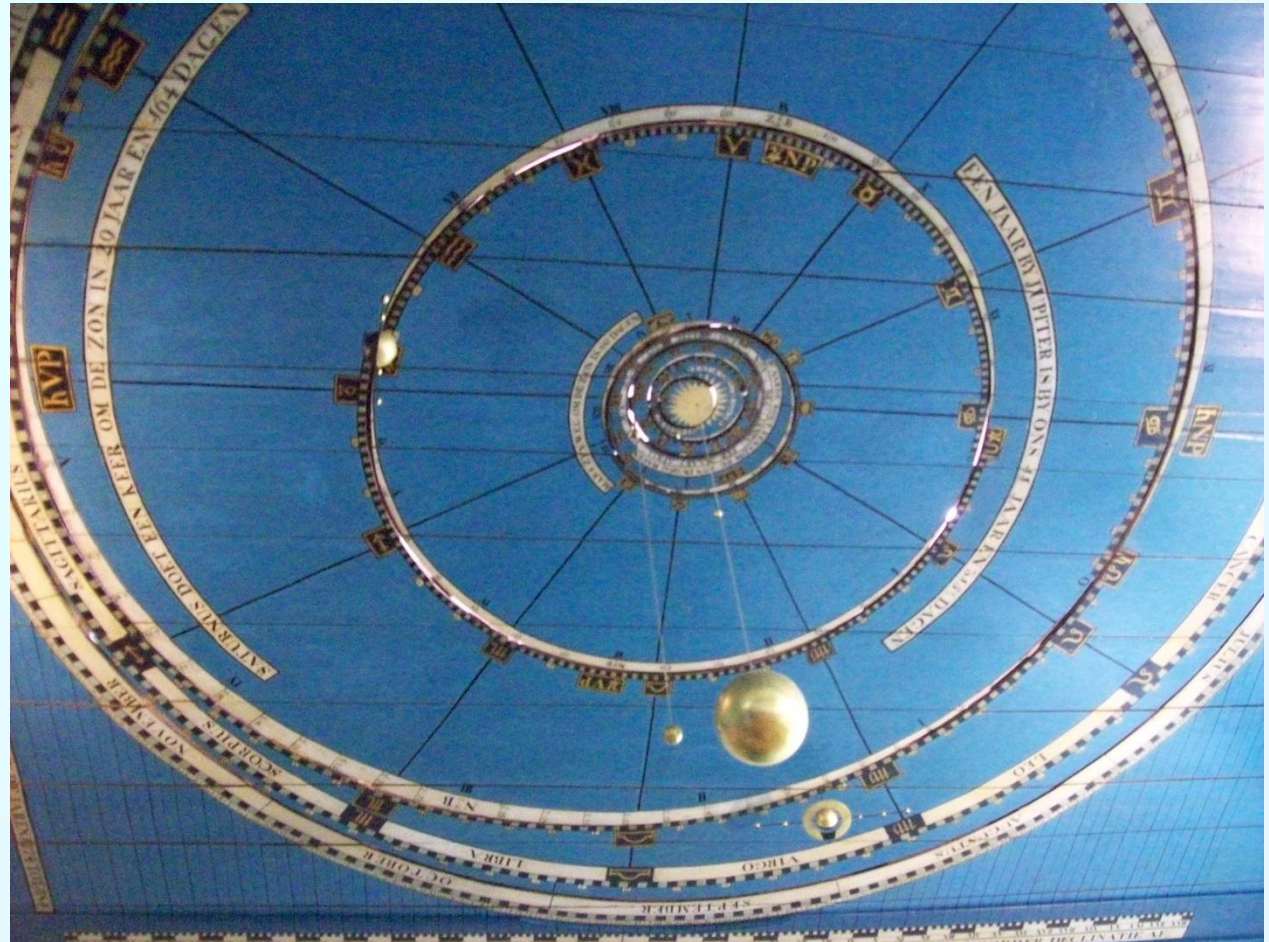


- Heliocentrisch
- Geeft betere voorspellingen
- Past beter in ons huidige wereldbeeld
- Uit andere theorie verklaarbaar

# En een model van dit model

## **Het planetarium van Eise Eisinga in Franeker.**

Aan het plafond van  
de woonkamer van  
een prachtig  
grachtenhuis in  
Franeker bevindt zich  
het oudste nog  
werkende planetarium  
ter wereld. Dit  
nauwkeurig bewegend  
model van het  
zonnestelsel werd  
tussen 1774 en 1781  
gebouwd door de  
Friese wolkamer  
Eise Eisinga.



# Model vs. werkelijkheid

- Waarom een model in plaats van werkelijkheid?
- Hoe gebruik ik een model?



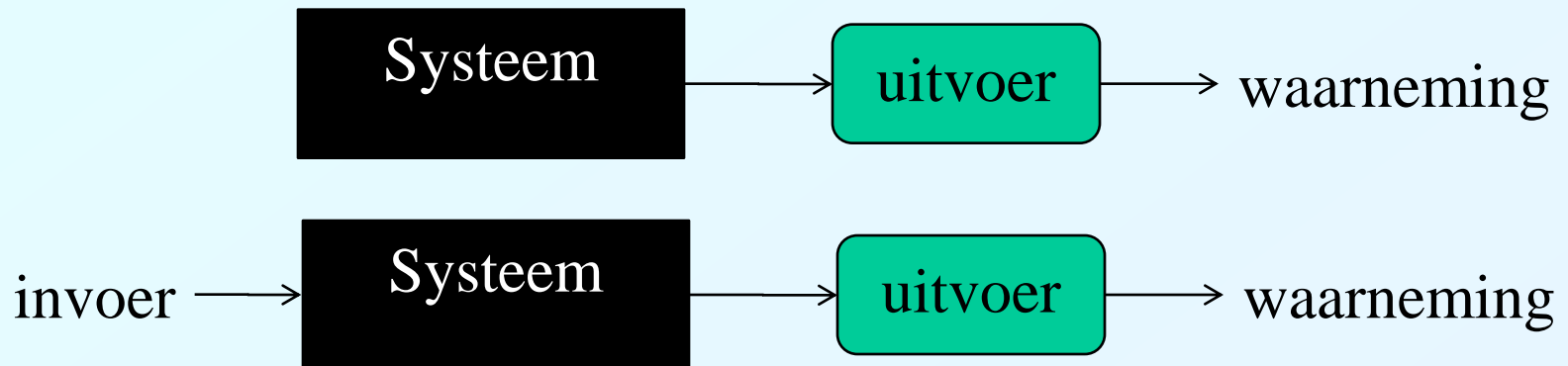
# Een beetje formeler

We gaan het hebben over

- Systemen
- Waarnemingen
- Experimenten
- Modellen
- Simulaties

# Systemen, waarnemingen, experimenten

- Een systeem is een “black box” die een proces uitvoert met een
  - Interne toestand (niet zichtbaar)
  - Uitvoer (waarneembaar)
  - Mogelijk invoer



# Definities - 1

Wat is een **SYSTEEM** ?

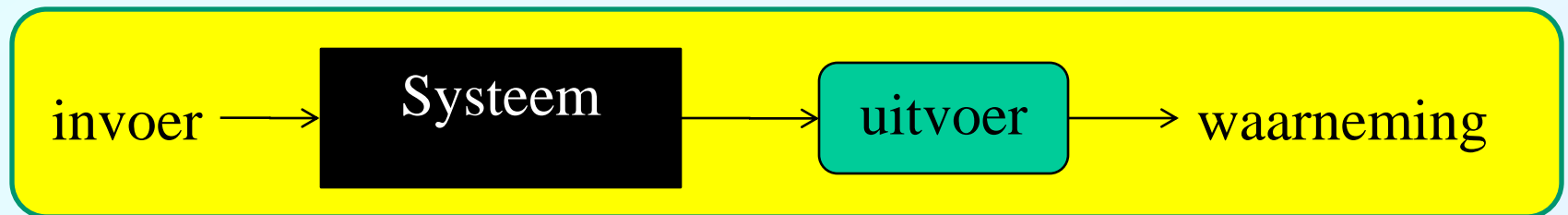
“A system is a potential source of data”

Bernard Siegler, *Theory of Modeling and Simulation*, 1976.

Wat is een **EXPERIMENT** ?

“An experiment is the process of extracting data from a system by exerting it through its inputs.”

François Cellier, *Continuous System Modelling*, 1990.



# Definitities - 2

Wat is een **MODEL**?

“ A model (M) for *a system (S) and an experiment (E)* is anything to which E can be applied in order to answer questions about S.”

Marvin Minski, *Models, Minds, Machines*, 1965.

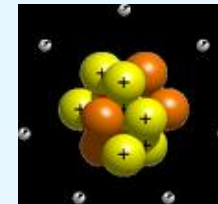
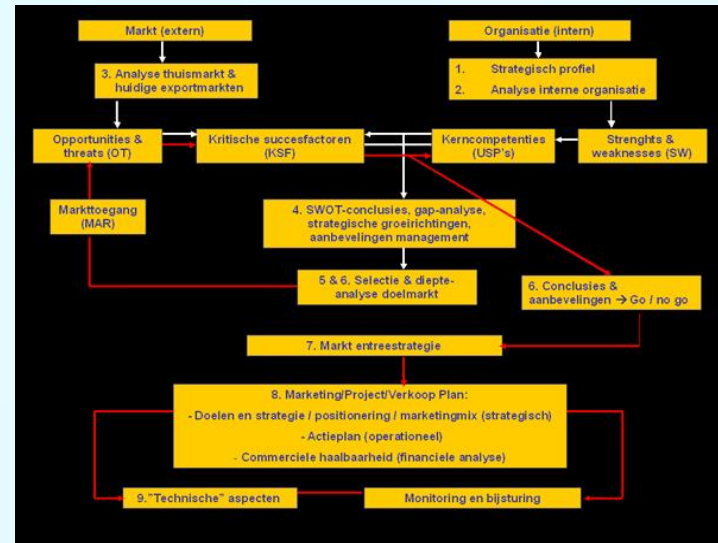
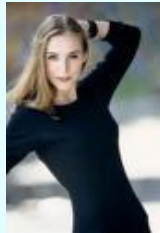
# Een model is

- Een model is een idealisatie
- Een model is een systeem waarvan je voor een bepaald experiment verwacht dat het vergelijkbare uitvoer geeft als het oorspronkelijke systeem, maar
- het is eenvoudiger, opener, goedkoper of hanteerbaarder dan het oorspronkelijke systeem.

# Een model heeft beperkingen

- Het heeft een domein waarbinnen het geldig is
- Het representeert vaak maar een deel van het oorspronkelijke systeem
- De uitvoer komt niet exact overeen met die van het oorspronkelijke systeem (nauwkeurigheid)

# Model of geen model?

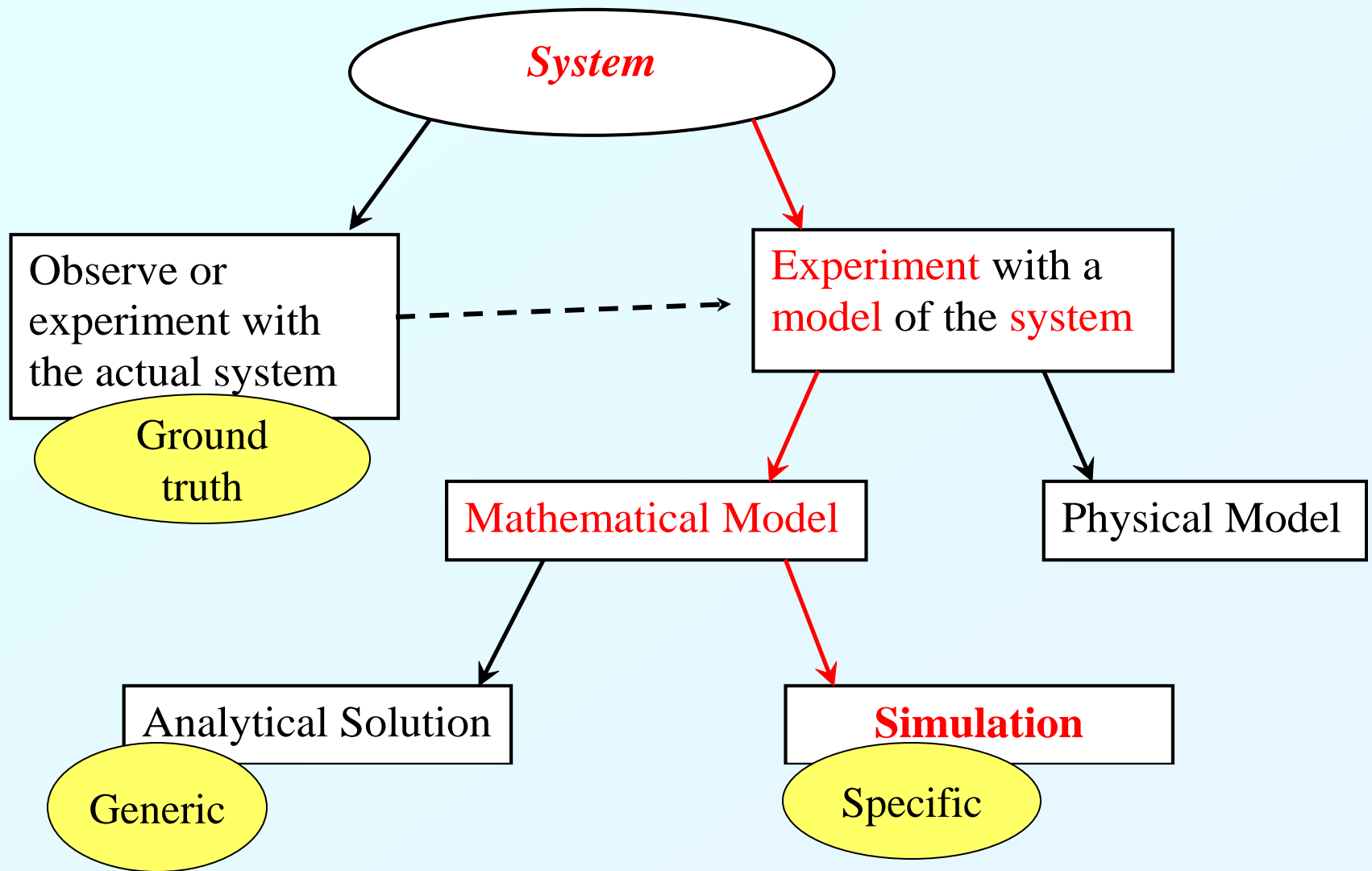


# Zijn modellen belangrijk?

- Waar spelen modellen eigenlijk geen rol?



# Hoe bestudeer je een systeem



# Quotes

“Essentially, all models are wrong, but some are useful.”

– George Box and Norman Draper (1987)

“. . . the only complete description of a system is the system itself.”

– Walter Freeman (1975)

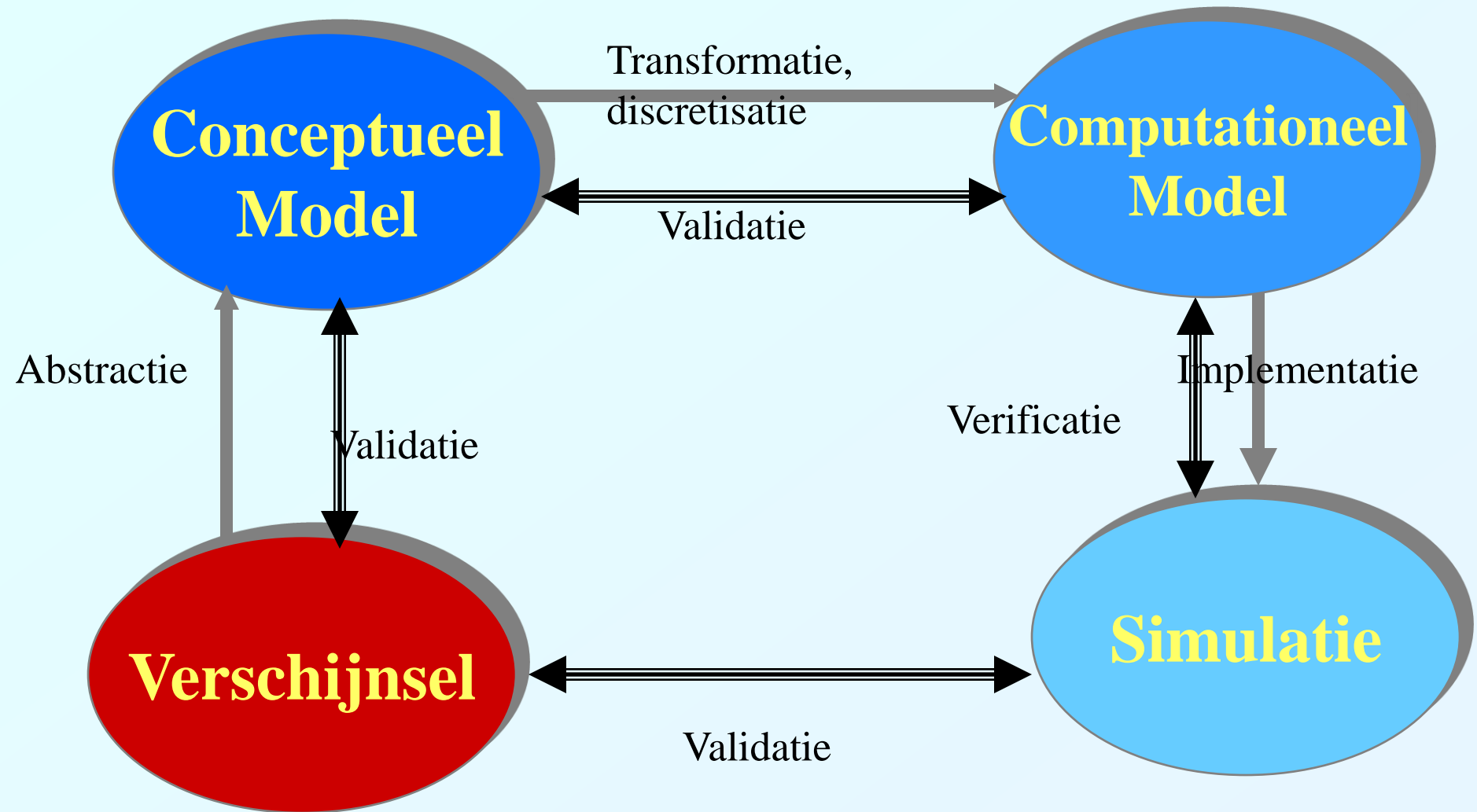
“Only an idiot uses simulation in place of analytical techniques”

– Francois Cellier

# Analytische oplossingen

- Wiskundig model vaak stelsel van differentiaal- of integraalvergelijkingen
- Kunnen met de hand worden opgelost, of
- Gebruik “Computer Algebra” systemen
  - Mathematica
  - Maple
  - Sage
  - ...

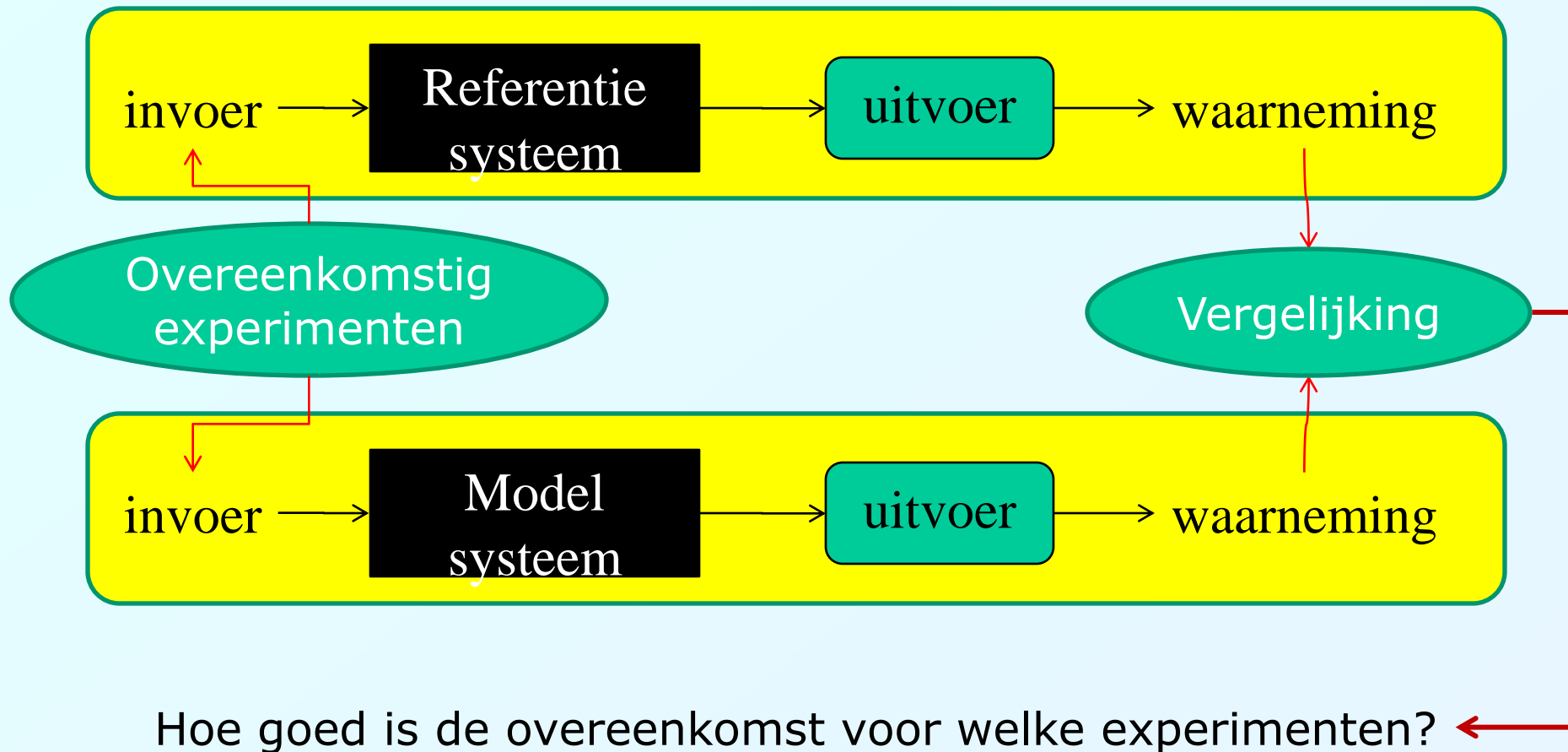
# *Van de Natuur naar de Computer*



# Validatie en Verificatie

- Validatie test of het model een “juiste” beschrijving geeft van het oorspronkelijke systeem
- Verificatie test of een simulatie het model correct implementeert

# Validatie



# Meer quotes

“Modeling means the process of organizing knowledge about a given system”

- Bernard Ziegler, Multifaceted Modeling and Discrete Event Simulation, 1984

“... it can thus be said that modeling is the single most central activity that unites *all* scientific and engineering endeavors. While the scientist is happy to simply *observe* and *understand* the world, i.e., create a model of the world, the engineer wants to modify it to his advantage. While science is all *analysis*, the essence of engineering is *design*..”

“... *simulation* can be used not only for analysis (direct problems) but also for design (inverse problems).”

- François Cellier, Continuous System Modelling, 1990

# En nog meer

- “By definition, a model can be qualified as a system, which allows to cut out smaller pieces to generate a new model (*hierarchy of models*)”
  - Jack Kleijnen, “Concept of Meta-Models,” in *Progress in Modelling and Simulation*, 1982.



# Merk op ...

- Een model hoeft geen computer programma te zijn !
- *Mathematische Modellen* kunnen dat wel zijn.
- Een model is altijd gekoppeld aan de **tuple** *Systeem* en *Experiment*.
- Model **validatie** betreft *altijd* een experiment op een systeem.

# Zijn simulatiemodellen belangrijk?

- Noem er eens een paar...

Financiële modellen

Weerbericht

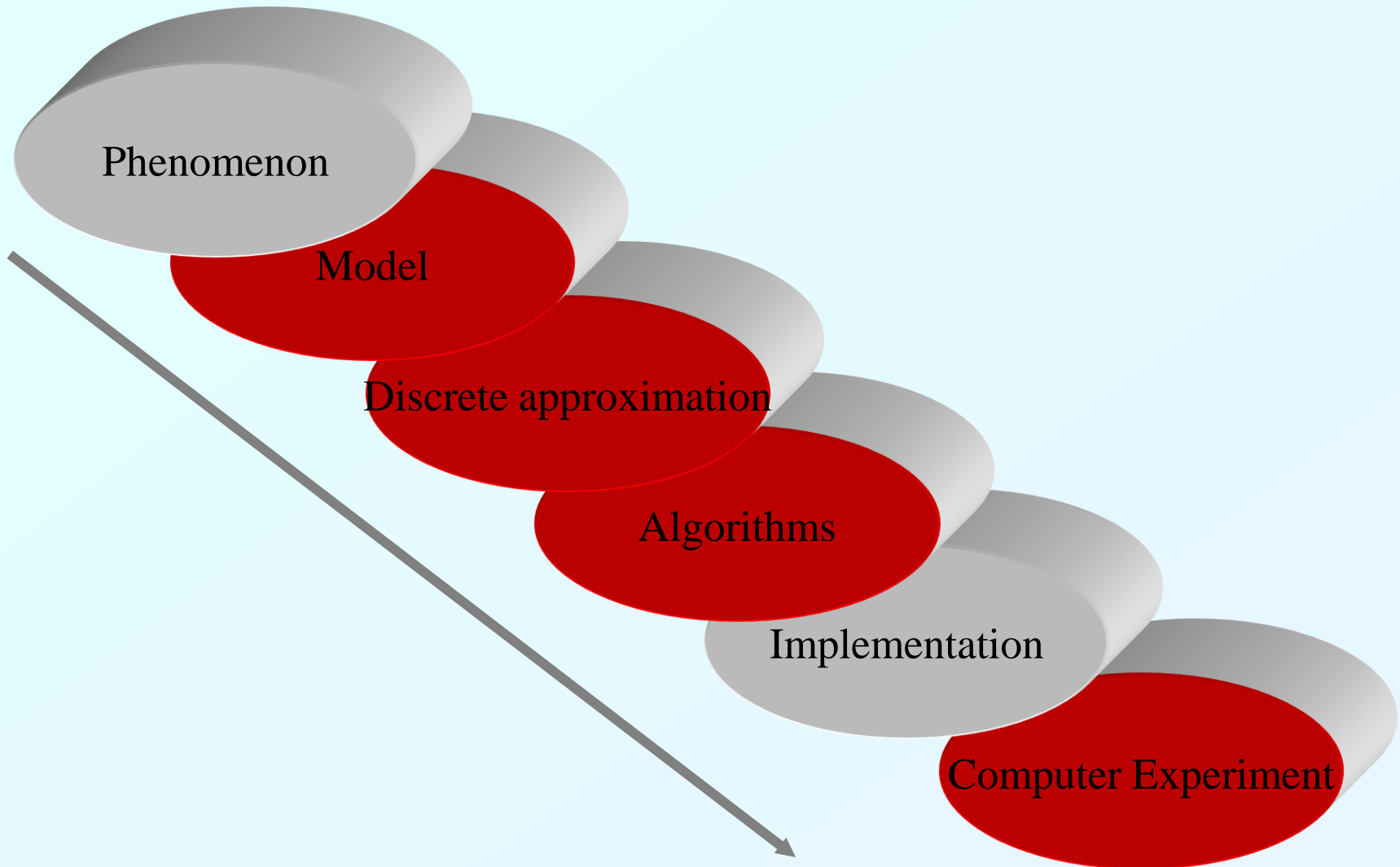
Sterkteberekeningen

Klimaatmodellen

Performancemodellen

Simulatie medische ingrepen

# Het experiment op de computer I

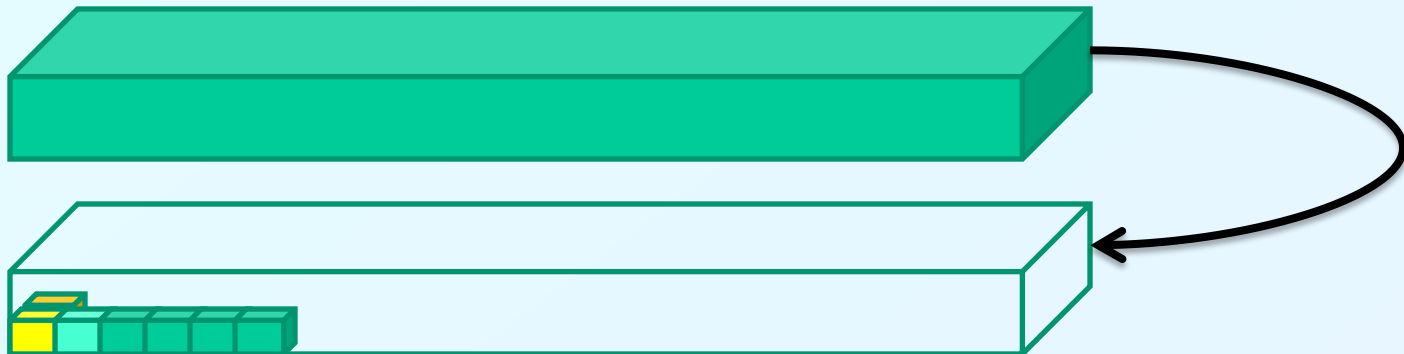


# Het experiment op de computer II

- Interpretatie van je gegevens
  - Visualizatie & Virtual Reality
- Gevoeligheids Analyse
- Prestatie optimalisatie
- Model verfijning
- Interactieve Simulatie
  - man-in-the-loop
  - VR-HPC
  - DDDAS (Dynamic data-driven adaptive simulation)

# Discretisatie

- Meestal geen continue functies maar
  - Toestandsgrootheden als functie van plaats en/of tijd
  - Representatie met eindige precisie
  - Van differentiaalvergelijkingen naar differentievergelijkingen “finite difference”



# De toestandsvector

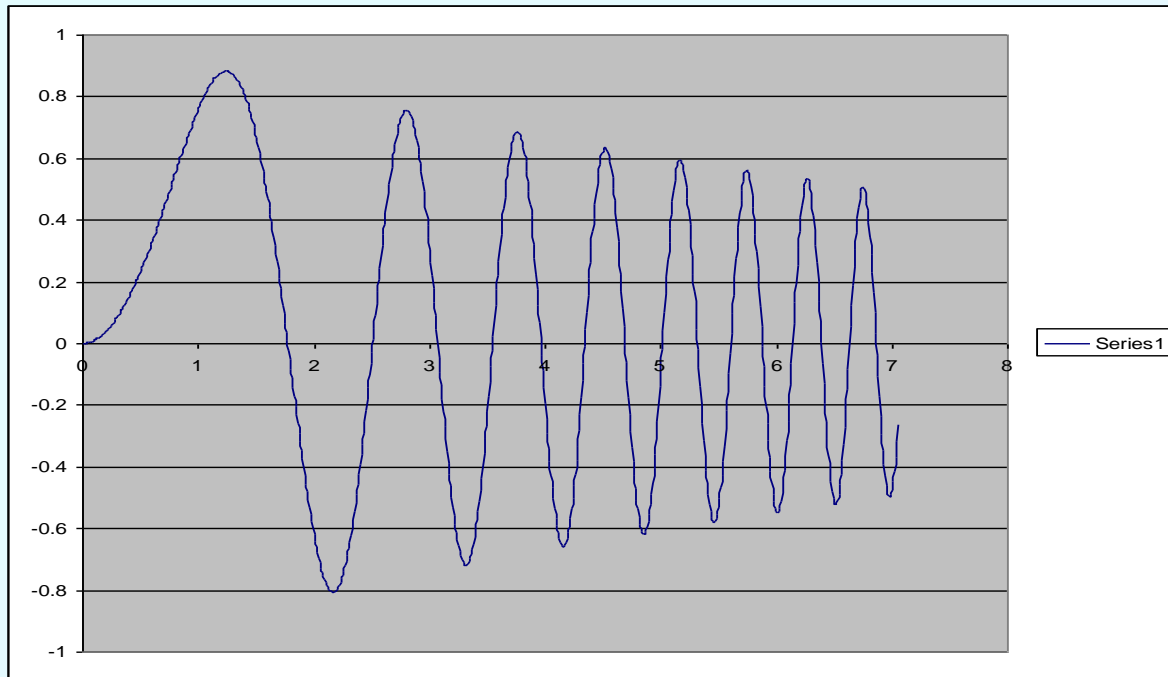
- Toestand van het systeem:
  - Eindige reeks waarden
  - Meest getallen
  - Ook Boolse waarden, fuzzy waarden, etc.
- Al deze waarden samen noemen we de “toestandsvector”

# Algoritmen

- Directe vertaling vergelijkingen geeft vaak problemen
  - Nauwkeurigheid
  - Stabiliteit
  - Kosten (tijd en geheugen)
  - ...
- Slimmere aanpak (algoritme nodig)

# In dit college

- Tijdsafhankelijke continue modellen
  - Vaak differentiaal vergelijkingen





# Zoiets

- Binnen een eindige tijd, veranderen de toestandsvariabelen oneindig vaak van waarde
- Weergave: Vaak als een stelsel van differentiaalvergelijkingen
  - Lumped parameter models: ODE

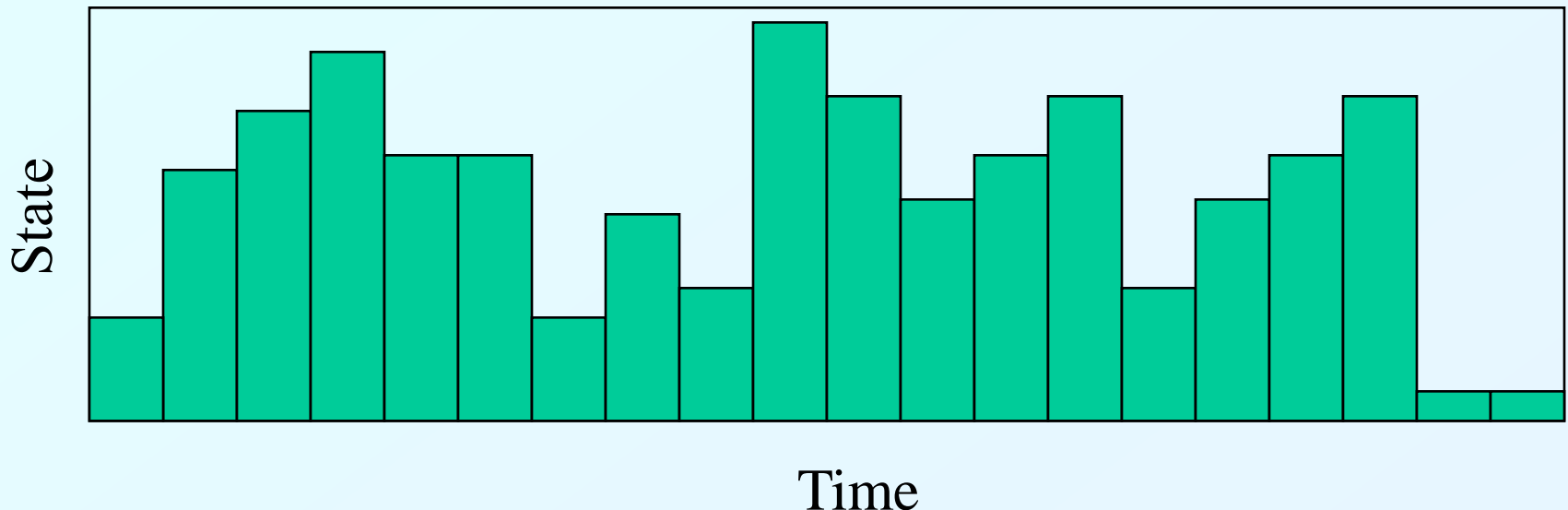
$$\frac{dx}{dt} = f(x, u, t)$$

- Distributed parameter models: PDE

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \sigma \cdot \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$$

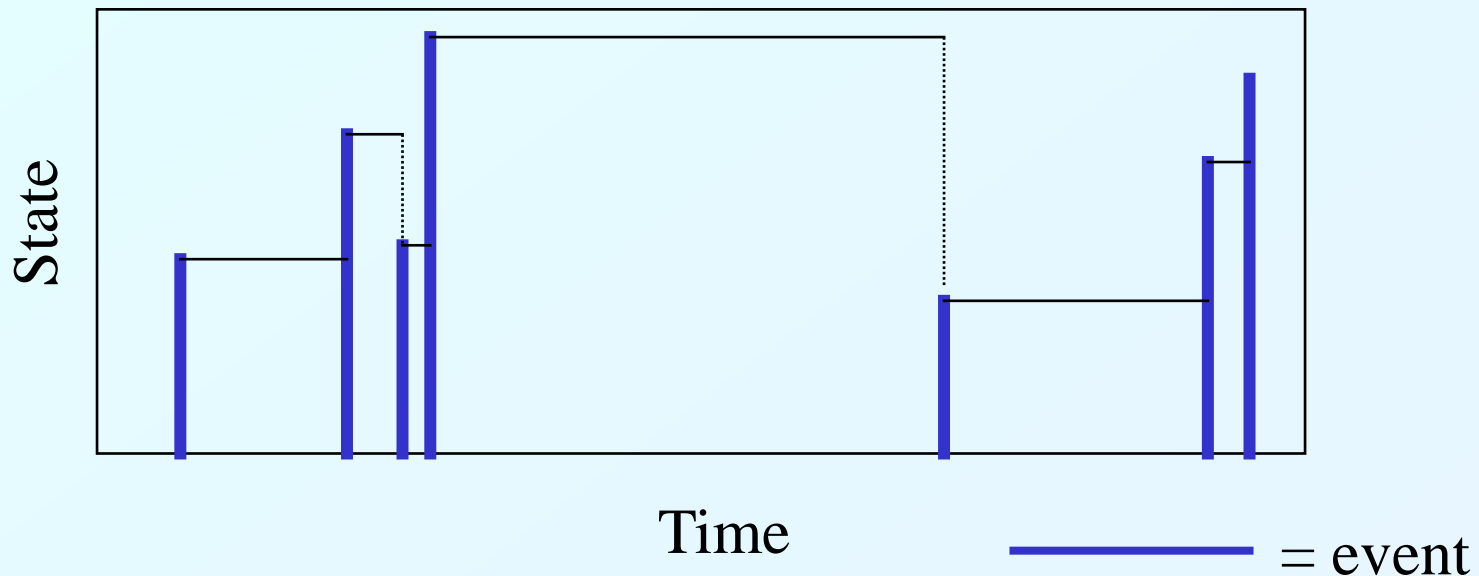
# In de computer dus meer

- Discrete-Tijd Modellen
  - De tijd-as is gediscretiseerd
  - Weergave: differentie vergelijkingen
  - $X(t_{k+1}) = f(x_k, u_k, t_k)$



# *Ook leuk - doen we niet*

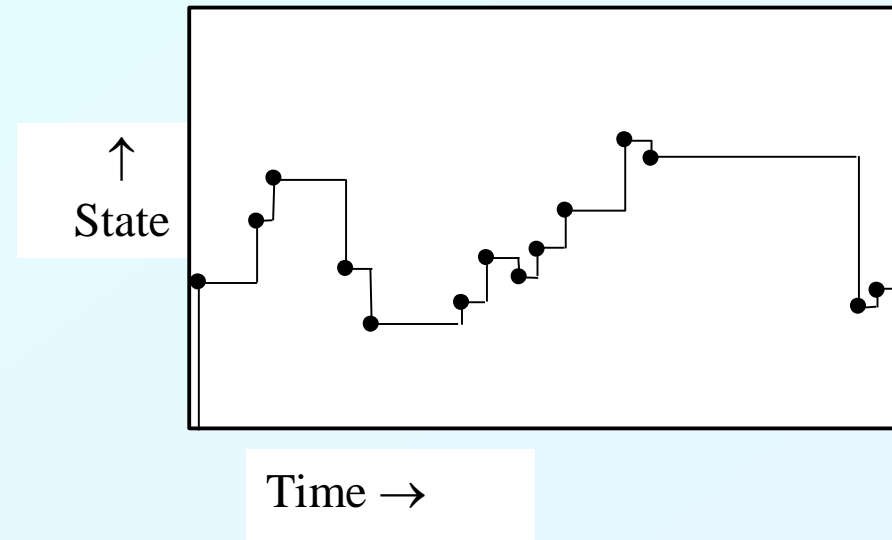
- **Discrete-Event Modellen**
  - Toestandsovergangen vinden plaats op bepaalde tijdstippen. De modeltijd "springt" steeds naar de volgende gebeurtenis (event). Events kunnen op ieder moment optreden.
- Er is geen eenvoudige wiskundige beschrijving. Modellen op basis van (stochastische) processen.



# Dit dus

- **Discrete Event model**

- Toestandsvariabelen veranderen op discrete tijdstippen.
- Maar zowel de tijd als de toestandsvector mogen bij Discrete Event Modellen continu zijn.
- In een eindige tijd mogen slechts eindig veel toestands-overgangen plaats vinden.



# Ook niet

- Modellen zonder (expliciete) tijd
  - B.v. sterkteberekening
  - Berekening in Fourierdomein
- Kan weer gebruikt worden binnen een model met tijd

# Overview Mathematical Models

Mathematical Models with Time

(Models without Time)

Continuous Time

examples in this lecture  
and in Master Grid  
Computing

Discrete Time

In many cases  
discretized versions of  
continuous time  
models.

But also inherent  
discrete time models  
like Cellular Automata  
(see advanced courses  
in Master Grid  
Computing)

More examples in this  
lecture

Discrete Event

Detailed description  
in Master Grid  
Computing

# Execution Models

- Time-driven simulation
- Event driven simulation
- Combinations

# Time Driven

- the simulation clock is advanced in increments of exactly  $\Delta t$  time units
- the time step  $\Delta t$  is small enough to capture every event in the system
- the time step  $\Delta t$  may be fixed or re-evaluated at every step



# Event Driven

- **Step 1:** The simulation clock is initialized to zero and the times of occurrence of future events are determined.
- **Step 2:** The simulation clock is advanced to the time of the occurrence of the most imminent (i.e. first) of the future events.
- **Step 3:** The state of the system is updated to account for the fact that an event has occurred.
- **Step 4:** Knowledge of the times of occurrence of future events is updated and the first step is repeated.

# Stof

- Inleiding modelleren
- Inleiding simulatie
  - Met voorbeelden
- Inleiding calculus

# Doel van het college

- Modelmatig denken
- Het gebruik van modellen
- Het gebruik van computers bij de evaluatie van modellen
- De beperkingen van modellen
- De ingrediënten van wiskundige modellen en simulaties
  - Continue wiskunde, calculus
  - Computer modellen
  - Getalrepresentatie
  - Verificatie en validatie

# Wat gaan we zoal doen

- Inleiding calculus/continue wiskunde
  - differentiatie, integratie, ODE, PDE, reeks ontwikkelingen, convergentie, etc.
- Leren computer modellen te bouwen
- Experimenteren met computer modellen

# Wat gaan we zoal doen

- Inzicht krijgen in het verband tussen:
  - model/algorithm/implementatie (+experiment/interpretatie)
- Inzicht krijgen in soorten modellen
- Een beetje validatie
- Getalrepresentatie op de computer
- Voorplanting van fouten

# Structuur van het college

## semester 2, period a and b

- 12 x colleges
  - 5 x calculus
  - 7 x modelleren en simuleren
- 8 x practica M&S (verplicht) met
  - 5 in te leveren opdrachten
    - Inleiding Mathematica
    - Populatie dynamica
    - Numeriek integreren in C of Java
    - Warmtegeleiding
    - Warmtegeleiding parallel
- 4 x werkcolleges wiskunde (verplicht)
  - Huiswerkopgaven inleveren
- Deeltentamen en tentamen

# Deze maand

- 2-2 college inleiding
- 3-2 practicum 13-15 in JK302
- 9-2 college differentiëren, Taylor reeksen
- 10-2 werkcollege 11-13 in P016
- 16-2 college populatiedynamica
- 17-2 practicum 13-15 in P124
- 22-2 deadline eerste opgave
- 23-2 college differentiaalvergelijkingen
- 24-2 werkcollege 11-13 in P016