Τμήμα Περιβάλλοντος
Σχολή Τεχνολογίας
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Εισαγωγή – Ορισμοί
Μέθοδοι
Μαθηματικής Μοντελοποίησης

Δρ. Δ. Κασιτεροπούλου, Αναπληρώτρια Καθηγήτρια ΠΘ

Τι είναι η Μαθηματική Μοντελοποίηση;

Η μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς απλών ή πολύπλοκων συστημάτων με τη χρήση των Μαθηματικών.

Οι στόχοι της μαθηματικής μοντελοποίησης ενός συγκεκριμένου συστήματος (φαινομένου) είναι οι εξής:

- Η μελέτη και κατανόηση της συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων με τη χρήση των Μαθηματικών.
- Η χρήση και η ανάπτυξη νέων, μαθηματικών εργαλείων που απαιτούνται για τη επίλυση ενός μοντέλου.
- Η πρόβλεψη / προσομοίωση (prediction/simulation) συμπεριφορών και ιδιοτήτων πολύπλοκων συστημάτων μέσω των μαθηματικών μοντέλων.
- Ο έλεγχος των υποθέσεων ενός μοντέλου και η αντίστοιχη βελτίωσή του.

Γιατί όμως χρειαζόμαστε υποθέσεις/παραδοχές για κάθε μαθηματικό μοντέλο ενός πραγματικού φαινομένου;

- Όλα τα πραγματικά συστήματα – φαινόμενα είναι ιδιαίτερα πολύπλοκα και αποτελούνται ή περιγράφονται από ένα τεράστιο εύρος (ακόμη και άπειρο πολλές φορές) διαφορετικών παραμέτρων.
- Κανένα μαθηματικό μοντέλο δεν μπορεί να συμπεριλάβει όλες αυτές τις παραμέτρους, οι οποίες πολλές φορές είναι επιπλέον άγνωστες.
- Δεν απαιτείται από το μοντέλο να συμπεριλαμβάνει όλες τις πιθανές παραμέτρους που επηρεάζουν ένα σύστημα αλλά μόνο τις πιο σημαντικές.

Ποια μαθηματικά μοντέλα υπάρχουν;

- Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων (Ανάλογα με το είδος των εξισώσεων που χρησιμοποιούνται)
- Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα: ανάλογα με ύπαρξη ή μη τυχαιότητας στο μοντέλο.
- Διακριτά / Συνεχή μοντέλα ανάλογα με το είδος των μεταβλητών που ορίζονται.
- Γραμμικά / Μη γραμμικά μοντέλα, ανάλογα με το αν οι μαθηματικές σχέσεις είναι γραμμικές ή όχι.
- Χρόνο-εξαρτώμενα / Χρόνο-ανεξάρτητα ανάλογα με το αν οι παράμετροι του προβλήματος μεταβάλλονται με το χρόνο.
- Μηχανιστικά / Περιγραφικά, ανάλογα με το αν προκύπτουν από βασικούς νόμους ή είναι περισσότερο μια ποιοτική περιγραφή του υπό μελέτη συστήματος

Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων

- Στα μαθηματικά μία μερική διαφορική εξίσωση (ΜΔΕ) είναι μια διαφορική εξίσωση η οποία περιέχει άγνωστες συναρτήσεις πολλαπλών μεταβλητών και τις μερικές παραγώγους αυτών.(Σε αντίθεση με τις συνήθεις διαφορικές εξισώσεις, οι οποίες ασχολούνται με τις συναρτήσεις μιας μεταβλητής και τα παράγωγά τους.)
- Οι ΜΔΕ χρησιμοποιούνται για να διαμορφώσουν τα προβλήματα που αφορούν τις συναρτήσεις πολλών μεταβλητών, και είτε λύνονται με το χέρι, ή χρησιμοποιούνται για να δημιουργήσουν ένα σχετικό υπολογιστικό μοντέλο.

Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων (ενδεικτικά εξισώσεις)

χαρακτηριστικά τους:

❖ <u>Το πλήθος των μεταβλητών.</u>

Το πλήθος των μεταβλητών είναι το πλήθος των ανεξάρτητων μεταβλητών.

Παραδείγματα:

$u = u$ δύο μεταβλητές t και x

Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων (ενδεικτικά εξισώσεις)

Με τον όρο τάξη μιας ΜΔΕ εννοούμε την τάξη της μέγιστης μερικής παραγώγου της εξίσωσης.

Παραδείγματα:

$u_t = u_{xx}$ 2ης τάξης

$u_t = u_x$ 1ης τάξης

$u_{xxx} + u_t = 6\, u\, u_x$ 3ης τάξης

Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων (ενδεικτικά εξισώσεις)

❖ Γραμμικότητα μιας Μερικής Διαφορικής Εξίσωσης

Μια ΜΔΕ λέγεται γραμμική όταν η συνάρτηση F είναι αλγεβρικά γραμμική ως προς την u και όλες τις παραγώγους της, και οι συντελεστές της u και των παραγώγων της εξαρτώνται αποκλειστικά από τις ανεξάρτητες μεταβλητές.

Παραδείγματα:

$uu_{xx} + u_t = 0$ μη γραμμική

$xu_x + y\, u_y + u^2 = 0$ μη γραμμική

Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα: ανάλογα με ύπαρξη ή μη τυχαιότητας στο μοντέλο.

- **Ντετερμινιστικό:** Αν η μελλοντική κατάσταση του συστήματος, A(t), καθορίζεται πλήρως από δεδομένες αρχικές τιμές του συστήματος, A(0). Σε μια τέτοια περίπτωση δεν υπάρχει τυχαιότητα στην εξέλιξη της A.

- **Στοχαστικό:** Αν δεδομένες αρχικές τιμές του συστήματος, A(0) υπάρχουν περισσότερες από μία πιθανές μελλοντικές καταστάσεις, A(t). Οι καταστάσεις αυτές δεν είναι κατ' ανάγκη ισοπίθανες.

Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα: ανάλογα με αρξη ή μη τυχαιότητας στο μοντέλο.

Εύκολα καταλαβαίνουμε ότι η έννοια των στοχαστικών συστημάτων συνδέεται άμεσα με τις πιθανότητες και τις στοχαστικές διεργασίες.

❖ **Παραδείγματα ντετερμινιστικών συστημάτων:**

Κλασική μηχανική: Νόμοι του Νεύτωνα.
Κβαντική μηχανική: Εξίσωση Schroendiger.
Ροή ρευστών: Εξισώσεις Navier-Stokes.
Ντετερμινιστικό Χάος.

❖ **Παραδείγματα στοχαστικών συστημάτων:**

Τυχαίοι περίπατοι (Random walks).
Κίνηση Brown.
Χρηματιστήριο: Τιμές μετοχών.
Τιμές βιολογικών-ιατρικών παραμέτρων ασθενών. κλπ.

Ποια μαθηματικά μοντέλα υπάρχουν;

- Μοντέλα συνεχών διαφορικών εξισώσεων, ή μερικών διαφορικών εξισώσεων (Ανάλογα με το είδος των εξισώσεων που χρησιμοποιούνται)
- Ντετερμινιστικά / Στοχαστικά μοντέλα: ανάλογα με ύπαρξη ή μη τυχαιότητας στο μοντέλο.
- Διακριτά / Συνεχή μοντέλα ανάλογα με το είδος των μεταβλητών που ορίζονται.
- Γραμμικά / Μη γραμμικά μοντέλα, ανάλογα με το αν οι μαθηματικές σχέσεις είναι γραμμικές ή όχι.
- Χρόνο-εξαρτώμενα / Χρόνο-ανεξάρτητα ανάλογα με το αν οι παράμετροι του προβλήματος μεταβάλλονται με το χρόνο.
- Μηχανιστικά / Περιγραφικά, ανάλογα με το αν προκύπτουν από βασικούς νόμους ή είναι περισσότερο μια ποιοτική περιγραφή του υπό μελέτη συστήματος

Ποια μαθηματικά εργαλεία υπάρχουν;

• Μέθοδοι επίλυσης γραμμικών εξισώσεων.

• Μέθοδοι επίλυσης συνήθων και μερικών διαφορικών εξισώσεων, όπως χωρισμός μεταβλητών κλπ.

• Μέθοδοι επίλυσης στοχαστικών εξισώσεων.

• Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης ΣΔΕ, όπως Newton–Raphson, Runge–Kutta κλπ.

• Αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης ΜΔΕ, όπως πεπερασμένες διαφορές, πεπερασμένα στοιχεία, φασματικά στοιχεία, κλπ.

• Μέθοδοι προσομοίωσης, όπως Μοριακή Δυναμική (Molecular Dynamics) και μέθοδοι Monte Carlo.

Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

- Η Μέθοδος των Ελαχίστων Τετραγώνων (ΜΕΤ) χρησιμοποιείται για την κατασκευή της γραφικής παράστασης που περιγράφει ένα φαινόμενο, όταν γνωρίζουμε ΜΟΝΟΝ μια σειρά από πειραματικές τιμές των μεγεθών που το περιγράφουν και ΟΧΙ την ακριβή μαθηματική σχέση τους (τύπο).

- Στην πραγματικότητα, κατά τη μελέτη ενός φαινομένου, προσπαθούμε να προσδιορίσουμε τη μορφή της άγνωστης μαθηματικής σχέσης, στην οποία ταιριάζουν καλύτερα τα πειραματικά μας δεδομένα, ελέγχοντας μια σειρά γνωστών σχέσεων.

Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

Η μέθοδος χρησιμοποιείται όταν θέλουμε να συσχετίζουμε:

- Μία ιδιότητα x με
- Μία ιδιότητα ψ

χρησιμοποιώντας μία θεωρητική εξίσωση. Η θεωρητική εξίσωση μπορεί να είναι: Γραμμική, Παραβολική, Εκθετική κλπ. Στο παρόν πείραμα θα εξετασθεί η γραμμική συσχέτιση δύο μεταβλητών.

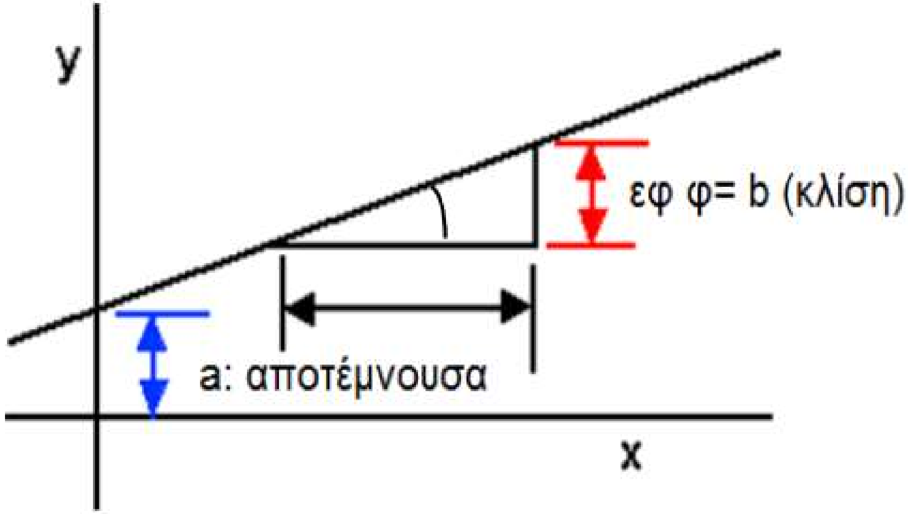
Σκοπός της άσκησης: Η χάραξη της βέλτιστης ευθείας που διέρχεται από τα πειραματικά σημεία, με χρήση της μεθόδου των ελαχίστων τετραγώνων.

Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

ψ: Θεωρητική εξίσωση της ευθείας:

$$\Psi_i = \alpha + b\, x_i$$

Αποτέμνουσα   Κλίση της ευθείας



Αποτέμνουσα → Σημείο τομής της ευθείας με τον άξονα yy'.

Κλίση → Εφαπτόμενη της γωνίας που σχηματίζει η ευθεία με τον άξονα xx'.

Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

Ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποκλίσεων μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών τιμών.

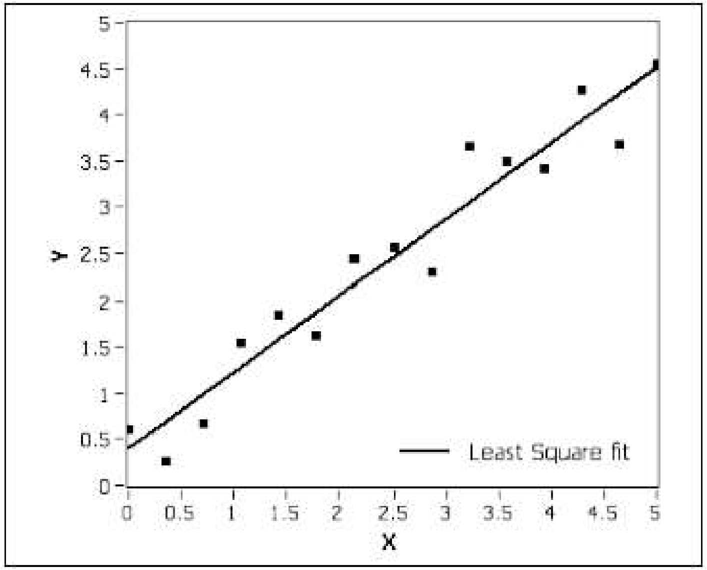
Συνάρτηση:

$$F(a,b)=\sum(\Psi\iota-\psi_\iota)^2=\sum(a+bx-\psi_\iota)^2 \longrightarrow \min$$

Ψ_i → Θεωρητική τιμή

ψ_i → Πειραματική τιμή

$$\Psi_i = a + b x_i$$



Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

Αποτέμνουσα:

$$a = \frac{\sum x_i^2 \cdot \sum \psi_i - \sum x_i \cdot \sum x_i \psi_i}{\nu \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2} \sum$$

Κλίση:

$$b = \frac{\nu \sum x_i \psi_i - \sum x_i \cdot \sum \psi_i}{\nu \cdot \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2}$$

Συντελεστής γραμμικής συσχέτισης:

$$r = \frac{\sum xi\psi i - \nu \cdot \bar{x} \cdot \bar{\Psi}}{[(\sum xi^2 - \nu \cdot \bar{x}^2) \cdot (\sum \psi i^2 - \nu \cdot \bar{\Psi}^2)]^{1/2}}$$

$$-1 \leq r \leq 1$$

Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

Ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποκλίσεων μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών τιμών.

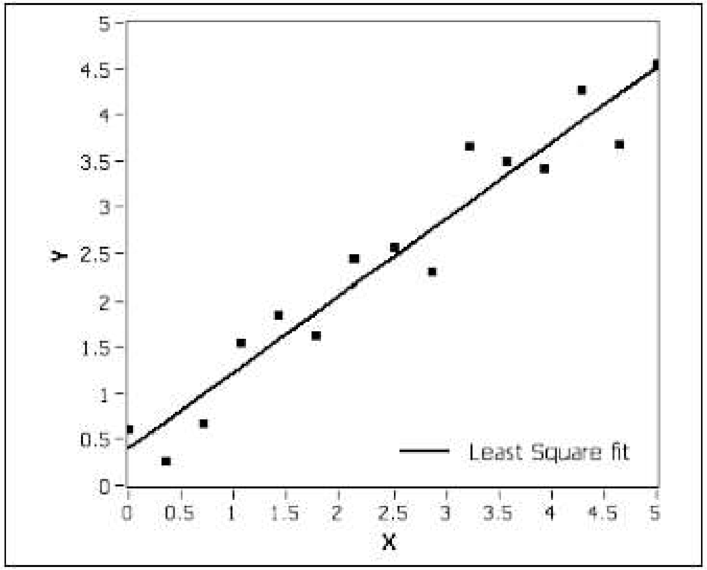
Συνάρτηση:

$$F(a,b) = \sum(\Psi\iota - \psi_\iota)^2 = \sum(a + bx - \psi_\iota)^2 \longrightarrow \min$$

Ψ_i → Θεωρητική τιμή

ψ_i → Πειραματική τιμή

$$\Psi_i = a + b x_i$$



Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων

Ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των αποκλίσεων μεταξύ θεωρητικών και πειραματικών τιμών.

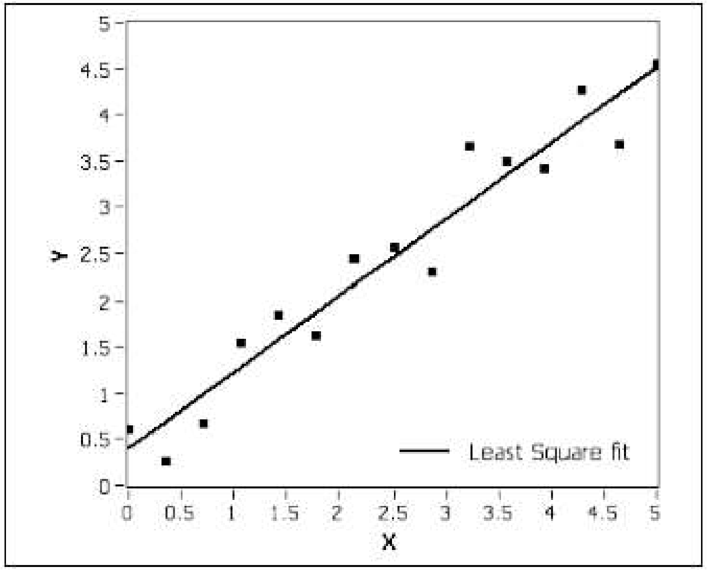
Συνάρτηση:

$$F(a,b)=\sum(\Psi\iota-\psi_\iota)^2=\sum(a+bx-\psi_\iota)^2 \longrightarrow \min$$

Ψ_i → Θεωρητική τιμή

ψ_i → Πειραματική τιμή

$$\Psi_i = a + b x_i$$



Βιβλιογραφία

- Μιχάλης Ταρουδάκης, Καθηγητής του Τμήματος Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων Μαθηματικών. «Μαθηματική Μοντελοποίηση», Σημειώσεις και ασκήσεις 2021. http://users.math.uoc.gr/~taroud/Modelling2021.html

- http://repfiles.kallipos.gr/html_books/9863/Ch1.S1.html
- Δημήτρης Στεφανάκης. «ΜΕΘΟΔΟΣ ΕΛΑΧΙΣΤΩΝ ΤΕΤΡΑΓΩΝΩΝ - ΧΑΡΑΞΗ ΓΡΑΦΙΚΗΣ ΠΑΡΑΣΤΑΣΗΣ», https://www.materials.uoc.gr/el/undergrad/courses/ETY204/MET_new.pdf.
- Ευάγγελος Φουντουκίδης, Τμήμα Πολιτικών Μηχανικών Τ.Ε. Πειραιά. «Περιβαλλοντική Χημεία. Ενότητα 2: Γραμμική Παλινδρόμηση και Μέθοδος Ελαχίστων Τετραγώνων», http://eclass.teipir.gr/openeclass/modules/document/file.php/CIVI125/02.1%20%CE%95%CE%BB%CE%AC%CF%87%CE%B9%CF%83%CF%84%CE%B1%20%CE%A4%CE%B5%CF%84%CF%81%CE%AC%CE%B3%CF%89%CE%BD%CE%B1.pdf

-https://el.wikipedia.org/wiki/

Farlow, S. J. (1993). Partial Differential Equations for Scientists and Engineers. New York: Dover Publications, Inc.
Logan, J. D. (2005). Εφαρμοσμένα Μαθηματικά. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
Thoe, E. C. (1986). Introduction to Partial Differential Equations with Applications. New York: Dover Publications, Inc.
www.math.ucsb.edu/~birnir/books/pde1.ps. (n.d.).
Δάσιος, Γ. &. (1994). Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις. Αθήνα.
Δάσιος, Γ. (2001). Δέκα Διαλέξεις Εφαρμοσμένων Μαθηματικών. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.
Τραχανάς, Σ. (2007). Μερικές Διαφορικές Εξισώσεις. Ηράκλειο: Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης.

http://repfiles.kallipos.gr/html_books/9863/Ch7.S1.html

Ευχαριστώ!