

# G0Q57A: Modelleren en simulatie

## Samenvatting

Arne Van Den Kerchove - [arne@vandenkerchove.com](mailto:arne@vandenkerchove.com)

22 januari 2019

# Inhoudsopgave

<b>1</b>	<b>Modellen en simulaties</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Numerieke lineaire algebra en toepassingen</b>	<b>4</b>
2.1	QR-factorisatie . . . . .	4
2.1.1	Gram-Schmidt orthogonalisatie . . . . .	4
2.1.2	QR-factorisatie met Givens-rotaties . . . . .	4
2.1.3	QR-factorisatie met kolompivotering . . . . .	5
2.2	Singuliere-waardenontbinding . . . . .	5
2.2.1	Lage rangbenadering . . . . .	6
2.3	Kleinste-Kwadratenbenadering . . . . .	6
2.3.1	Oplossing met QR-ontbinding . . . . .	7
2.4	Eigenwaardenproblemen . . . . .	7
2.4.1	Methode van de machten . . . . .	7
2.4.2	Deelruimte-iteratie . . . . .	8
2.4.3	QR-algoritme zonder shift . . . . .	8
2.4.4	Omvorming tot Hessenbergmatrix . . . . .	8
2.4.5	QR-algoritme met shift . . . . .	9
2.5	Toepassingen in de grafentheorie . . . . .	9
2.5.1	PageRank . . . . .	9
2.5.2	Meest centrale knoop . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Optimalisatie</b>	<b>10</b>
3.1	Optimalisatieproblemen zonder beperkingen . . . . .	10
3.1.1	Algemene afdalingsmethode . . . . .	11
3.1.2	Methode van de steilste afdaling . . . . .	11
3.1.3	Methode van Newton . . . . .	11
3.2	Optimalisatieproblemen met beperkingen . . . . .	11
3.2.1	Gelijkheidsbeperkingen . . . . .	11
3.2.2	Ongelijkheidsbeperkingen . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Trigoniometrische benadering</b>	<b>12</b>
4.1	Fourier-analyse . . . . .	12
4.2	Discrete Fourier-transformatie . . . . .	12
4.2.1	DFT en IDFT . . . . .	12
4.2.2	Daniel-Lanczos splitsingsalgoritme . . . . .	13
4.2.3	Snelle Fourier-transformatie . . . . .	13
4.3	Symmetrische discrete Fourier-transformaties . . . . .	14
4.3.1	Discrete cosinustransformatie . . . . .	14
4.3.2	Snelle cosinustransformatie . . . . .	14
4.3.3	Discrete sinustransformatie . . . . .	14
4.4	Meerdimensionele Fourier-transformatie . . . . .	15

<b>5</b>	<b>Toevalsgeneratoren</b>	<b>15</b>
5.1	Genereren van willekeurige getallen . . . . .	15
5.1.1	Lineaire congruentiële generator . . . . .	15
5.2	Testen voor toevalsgeneratoren . . . . .	16
5.2.1	Chi-kwadraattest . . . . .	16
5.2.2	Kolmogorov-Smirnov-test . . . . .	16
5.2.3	Autocorrelatietest . . . . .	16
5.3	Toevalsgeneratoren voor discrete verdelingen . . . . .	16
5.4	Toevalsgeneratoren voor continue verdelingen . . . . .	17
5.4.1	Transformatiemethode . . . . .	17
5.4.2	Box-Muller-algoritme . . . . .	17
5.4.3	Som van Twaalf . . . . .	17
5.4.4	Acceptance-rejection methode . . . . .	18

Antwoorden  
op exam-  
nevrage  
n opnemen

Dit hoofd-  
stuk als er  
tijd over is

## 1 Modellen en simulaties

## 2 Numerieke lineaire algebra en toepassingen

### 2.1 QR-factorisatie

**Definitie 1** De volle QR-factorisatie van de matrix  $A$  wordt gegeven door

$$A = QR$$

met  $Q$  een  $m \times m$  orthogonale matrix en  $R$  een  $m \times n$  bovendriehoeksmatrix.

#### 2.1.1 Gram-Schmidt orthogonalisatie

---

**Algorithm 1** Gram-Schmidt-algoritme

---

```
1: procedure QRGRAMSCHMIDT
2:   for  $j = 1$  to  $n$  do
3:      $v_j = a_j$ 
4:     for  $i = 1$  to  $j - 1$  do
5:        $r_{ij} = q_i^T a_j$ 
6:        $v_j = v_j - r_{ij} q_i$ 
7:      $r_{jj} = \|v_j\|_2$ 
8:      $q_j = v_j / r_{jj}$ 
```

---

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(2mn^2)$

**Stabiliteit:** niet stabiel

#### 2.1.2 QR-factorisatie met Givens-rotaties

**Definitie 2** Een Givens-rotatie is een  $m \times m$  orthogonale matrix van de vorm

$$G_{ij} = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$$

met

$$c^2 + s^2 = 1$$

Om een Givens-rotatie op te stellen die plaats  $(j, k)$  0 maakt in matrix  $A$ , kies dan een element in dezelfde kolom (bv. het element boven  $(j, k)$ ) op plaats  $(i, k)$  en maak  $G_{ij}$  met

$$c = \frac{a_{ik}}{\sqrt{a_{ik}^2 + a_{jk}^2}} \text{ en } s = \frac{a_{jk}}{\sqrt{a_{ik}^2 + a_{jk}^2}}$$

---

**Algorithm 2** Givens-rotatie-algoritme

---

```
1: procedure QRGIVENS
2:    $Q = \mathbb{1}$ 
3:    $R = A$ 
4:   for  $j = 1$  to  $n$  do
5:     for  $i = m$  to  $j + 1$  do
6:        $c = \frac{r_{i-1,j}}{\sqrt{r_{i-1,j}^2 + r_{i,j}^2}}$ 
7:        $s = \frac{r_{i,j}}{\sqrt{r_{i-1,j}^2 + r_{i,j}^2}}$ 
8:        $r_{i,j} = 0$ 
9:        $r_{i-1,j} = \sqrt{r_{i-1,j}^2 + r_{i,j}^2}$ 
10:      for  $k = j + 1$  to  $n$  do
11:        
$$\begin{bmatrix} r_{i-1,k} \\ r_{i,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{i-1,k} \\ r_{i,k} \end{bmatrix}$$

12:      for  $k = 1$  to  $m$  do
13:        
$$\begin{bmatrix} q_{k,i-1} & q_{k,i} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{k,i-1} & q_{k,i} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}$$

```

---

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(3mn^2 - n^3)$

**Stabiliteit:** stabiel

### 2.1.3 QR-factorisatie met kolompivotering

Indien  $A$  niet van volle rang is, is het voor de stabiliteit beter om kolompivotering toe te passen. In stap  $j$  van het QR-algoritme met Givens-rotaties verwisselen we kolom  $j$  met de kolom  $p$  waarvan de 2-norm het grootst is.

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(3mn^2 - n^3)$

**Stabiliteit:** stabiel voor rang-deficiënte matrices

## 2.2 Singuliere-waardenontbinding

**Definitie 3** De singuliere-waardenontbinding van matrix  $A$  wordt gegeven door

$$A = \hat{U} \hat{\Sigma} V^T$$

waarbij  $\hat{U}$  orthonormale kolommen heeft,  $\hat{\Sigma}$  een diagonaalmatrix met de singuliere waarden is en  $V$  een orthogonale matrix is.

Eigenschappen van de SVD:

- De rang van  $A$  is gelijk aan de rang van  $\Sigma$  is gelijk aan het aantal niet-nul singuliere waarden.

- De eerste  $r$  kolommen van  $U$  vormen een basis voor de kolomruimte van  $A$ .
- De laatste  $n - r$  kolommen van  $V$  vormen een basis voor de nulruimte van  $A$ .
- $A = U\Sigma V^T = \sum_{i=1}^r \sigma_i u_i v_i^T$
- $\text{norm}_2 A = \sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \dots + \sigma_r^2}$
- De singuliere waarden zijn de vierkantswortels van de eigenwaarden van  $A^T A$ . De kolommen van  $V$  zijn de bijhorende eigenvectoren.
- De singuliere waarden zijn de vierkantswortels van de  $n$  grootste eigenwaarden van  $AA^T$ . De eerste  $n$  kolommen van  $U$  zijn de bijhorende eigenvectoren.
- Als  $A$  symmetrisch is, zijn de singuliere waarden de absolute waarden van de eigenwaarden van  $A$ .

### 2.2.1 Lage rangbenadering

**Definitie 4** De  $\epsilon$ -rang van een matrix  $A$  wordt gedefinieerd als

$$\text{rang}(A, \epsilon) = \min_{\|A-B\|_2 \leq \epsilon} \text{rang}(B)$$

De matrix  $B$  ligt  $\epsilon$ - dicht bij  $A$  als hij een rang heeft die de kleinste is onder alle matrices die  $\epsilon$ - dicht bij  $A$  liggen.

**Definitie 5** Een rang  $k$ -benadering  $A_k$  met  $(k \leq r)$  van  $A$  wordt berekend door de singuliere waardenontbinding te vermenigvuldigen, maar  $\Sigma$  te vervangen door een diagonaal matrix met de  $k$  grootste singuliere waarden op de diagonaal.

Hierdoor geldt de eigenschap

$$\|A - A_k\|_2 = \min_{B \in \mathbb{R}^{m \times m}, \text{rang}(B) \leq k} \|A - B\|_2 = \sigma_{k+1}$$

Lagerangbenadering met QR

### 2.3 Kleinste-Kwadratenbenadering

Om de coëfficiënten te bepalen wordt een Vandermondematrix  $A$  opgesteld. De te minimaliseren fout bij KK-benadering wordt gegeven door

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \sqrt{\sum_{i=1}^m (b_i - \sum_{j=1}^n a_{i,j} x_j)^2}$$

met  $r = b - Ax$  de *residuvector*.

Dit probleem kan opgelost worden door  $x$  te bepalen in

$$A^T Ax = A^T b$$

De Vandermondematrix  $A$  is slecht geconditioneerd. We zoeken dus andere manieren om het KK-probleem op te lossen.

### 2.3.1 Oplossing met QR-ontbinding

Indien de QR-factorisatie van  $A$  bekend is, kan deze gebruikt worden om een oplossing voor het KK-probleem te vinden:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - QRx\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Q^T b - RAx\|_2$$

Aangezien vermenigvuldiging vooraan met een orthogonale matrix de norm behoudt.

De vector  $Q^T b = c$  kan opgesplitst worden in de volgende componenten:  $\begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix}$

met  $c_1 \in \mathbb{R}^n$  en  $c_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$

Hieruit volgt:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} x \right\|_2$$

Volgens de stelling van Pythagoras geldt:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} (\|c_1 - \hat{R}x\|_2^2 + \|c_2\|_2^2)$$

De vector  $x$  met coëfficiënten met minimale fout kan dus ook bekomen worden als  $x$  de oplossing van  $\hat{R}x = c_1$

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(mn) + \mathcal{O}n^2$  indien QR-factorisatie bekend.

**Stabiliteit:** stabiel indien  $A$  van volle rang.

## 2.4 Eigenwaardenproblemen

### 2.4.1 Methode van de machten

Deze methode vindt de eigenvector bij de grootste eigenwaarde en is geschikt voor ijle matrices.

$q_k$  zal convergeren naar  $\gamma_1 x_1$

**Voordelen:**

- Eenvoudige berekeningen
- zeer efficiënt voor ijle matrices

**Nadelen:**

- Zeer trage convergentie als  $\lambda_1$  niet sterk dominant is.

**Convergentie:** lineair, afhankelijk van afstand tussen grootste eigenwaarden.

---

**Algorithm 3** Methode der machten

---

```
1: procedure EIGENPOWERMETHOD
2:    $q_1$  random
3:   for  $k = 0, 1, 2, \dots$  do
4:     take  $\gamma_k$  such that  $\|q_{k+1}\|_2 = 1$ 
5:      $q_{k+1} = \frac{Aq_k}{\gamma_k}$ 
```

---

### 2.4.2 Deelruimte-iteratie

We itereren nu niet meer op één vector (methode der machten) maar op de volledige ruimte opgespannen door een orthonormaal stel vectoren.

Voor  $n$  eigenwaarden:

---

**Algorithm 4** Deelruimte-iteratie

---

```
1: procedure EIGENPARTIALSPACE
2:    $\hat{Q}_0 = [q_1^0 \ q_2^0 \ \dots \ q_n^0]$  random orthonormaal
3:   for  $k = 0, 1, 2, \dots$  do
4:      $\hat{P}_k = A\hat{Q}_{k-1}$ 
5:      $\hat{Q}_k \hat{R}_k = \hat{P}_k$  door QR-factorisatie
```

---

**Convergentie:** lineair, afhankelijk van afstand tussen eigenwaarden.

### 2.4.3 QR-algoritme zonder shift

---

**Algorithm 5** QR-algoritme zonder shift

---

```
1: procedure EIGENQR
2:   for  $k = 1, 2, 3, \dots$  do
3:      $A_k = Q_k R_k$  door QR-factorisatie
4:      $A_{k+1} = R_k Q_k$ 
```

---

$\tilde{Q}_k = [\tilde{q}_1^{(k)} \ \tilde{q}_2^{(k)} \ \dots \ \tilde{q}_i^{(k)}]$  convergeert naar de eigenvctoren van  $A$ .

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(km^3)$

### 2.4.4 Omvorming tot Hessenbergmatrix

Het aantal stappen in het QR-algoritme kan teruggebracht worden door eerst de matrix om te vormen naar een *Hessenbergvorm* m.b.v. Givens-rotaties.

**Complexiteit van omvorming:**  $\mathcal{O}(m^3)$



### 2.4.5 QR-algoritme met shift

De convergentie van het QR-algoritme kan versneld worden door een *shift* toe te passen.

---

**Algorithm 6** QR-algoritme met shift

---

```

1: procedure EIGENQRSHIFT
2:    $A = A_0$  Hessenberg
3:   for  $k = 1, 2, 3 \dots$  do
4:      $\kappa = a_{m,m}^{(k)}$ 
5:      $A_k - \kappa \mathbb{1} = Q_k R_k$  door QR-factorisatie
6:      $A_{k+1} = R_k Q_k + \kappa \mathbb{1}$ 

```

---

$\tilde{Q}_k = \begin{bmatrix} \tilde{q}_1^{(k)} & \tilde{q}_2^{(k)} & \dots & \tilde{q}_i^{(k)} \end{bmatrix}$  convergeert naar de eigenvectoren van  $A$ .

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(km^3)$

**Convergentie:** kubisch indien symmetrisch, anders lineair, afhankelijk van afstand tussen eigenwaarden.

## 2.5 Toepassingen in de grafentheorie

### 2.5.1 PageRank

Stel een grafe op van alle links op webpagina's naar andere webpagina's. Het gewicht van de edges wordt genormaliseerd met het aantal links op de pagina die verwijst. Stel deze grafe voor als matrix  $A$

$A$  geeft ook een Markov-model voor het web.

Gebaseerd op de matrix  $A$  wordt aan elke pagina  $P_i$  een score  $r(P_i) \geq 0$  toegekend via de volgende principes:

1. als veel andere pagina's naar  $P_i$  verwijzen, begunstigd dit  $r(P_i)$
2. als  $r(P_i)$  hoog is, begunstigd dit de score van pagina's waarnaar  $P_i$  verwijst.
3. als  $P_i$  weinig links heeft is dit begunstigend voor de pagina's waarnaar  $P_i$  verwijst.

Vervolgens wordt  $A$  omgevormd tot een *irreduceerbare* en *rij-stochastische* matrix  $\hat{A}$ . Volgens deze eigenschappen heeft  $\hat{A}$  1 als grootste eigenwaarde en kan de *PageRank*-vector met scores dus gevonden worden door het volgende stelsel op te lossen:

$$\hat{A}^T \Pi = \mathbb{1} \Pi$$

wat neer komt op het bepalen van de eigenvector van  $\hat{A}$  horende bij de dominante eigenwaarde 1.

### 2.5.2 Meest centrale knoop

Centraliteit van een knoop kan gemeten worden door het aantal verbindingen of lussen. Het aantal lussen van lengte  $n$  vertrekkende uit knoop  $i$  is  $(A^n)_{i,i}$ . Voor de definitie van de meest centrale knoop moeten lussen van elke lengte worden meegeteld, maar hoe groter de lengte, hoe minder gewicht er gegeven moet worden aan die lus.

**Definitie 6** *De centraliteit van een knoop  $i$  in matrix  $A$  wordt gegeven door  $(e^A)_{i,i}$  met  $e^A$  de matrix-exponentiële van matrix  $A$ , die berekend wordt als*

$$\mathbb{1} + \frac{A}{1!} + \frac{A^2}{2!} + \dots + \frac{A^n}{n!} + \dots$$

Indien de eigenwaardenontbinding van  $A$  bekend is als

$$A = X \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_N) X^{-1}$$

kan de matrix-exponentiële berekend worden als

$$e^A = X \text{diag}(e^{\lambda_1}, \dots, e^{\lambda_N}) X^{-1}$$

## 3 Optimalisatie

**Definitie 7** *De gradiënt van een functie  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  wordt gedefinieerd als*

$$\nabla f(x) := \left[ \frac{\partial f(x)}{\partial x_1} \quad \dots \quad \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right]^T$$

**Definitie 8** *De Hessiaan van een functie  $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  wordt gedefinieerd als*

$$\nabla^2 f(x) := \left[ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

**Definitie 9** *De Jacobiaan van een functie  $K : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$  wordt gedefinieerd als*

$$J_K f(x) := \left[ \frac{\partial k_i(x_1, \dots, x_n)}{\partial x_j} \right]_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

De Hessiaan van  $f(x)$  is de Jacobiaan van haar gradiënt  $(\nabla f)(x)$

### 3.1 Optimalisatieproblemen zonder beperkingen

De helling in de richting van de gradiënt is het grootst.

### 3.1.1 Algemene afdalingsmethode

Een iteratie van afdalingsmethode om een minimum van een functie  $f$  te vinden begint met het vinden van een volgend iteratiepunt  $x^{(k)}$ . Dit gebeurt in twee stappen:

1. Bereken een *trial*-stap  $h^{(k)}$  waarvoor  $[h^{(k)}]^T \nabla f(x^{(k)}) < 0$
2. Zoek de stapgrootte  $\alpha^{(k)} > 0$  zodat  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} h^{(k)}$  een lagere functiewaarde geeft dan  $f(x^{(k)})$

algoritme

In veel methodes neemt  $\alpha$  af naarmate het minimum nadert.

### 3.1.2 Methode van de steilste afdaling

De richting waarin  $f$  het snelst daalt wordt bepaald door

$$h^{(k)} = -\nabla f(x^{(k)})$$

Dit zorgt voor inefficiëntie door een zig-zagverloop omdat  $\alpha^{(k)}$  vaak te groot is.

### 3.1.3 Methode van Newton

De afdaalrichting  $h^{(k)}$  wordt bepaald door  $f(x)$  in de omgeving van  $x^{(k)}$  door een *kwadriek*:

$$f(x^{(k)} + h) \approx q(h) := f(x^{(k)}) + h^T \nabla f(x^{(k)}) + \frac{1}{2} h^T \nabla^2 f(x^{(k)}) h$$

Deze benaderende functie heeft in punt  $x^{(k)}$  dezelfde gradiënt (raakvlak) en dezelfde Hessiaan (kromming) als  $f(x)$ .

De richting naar het nieuwe iteratiepunt is het minimum van deze kwadriek, berekend door  $\nabla q(h) = 0$ :

$$h^{(k)} = -[\nabla^2 f(x^{(k)})]^{-1} \nabla f(x^{(k)})$$

**Convergentie:** Kwadratisch indien Hessiaan niet-singulier in het attractiepoint en startwaarde in attractiegebied van minimum.

## 3.2 Optimalisatieproblemen met beperkingen

### 3.2.1 Gelijkheidsbeperkingen

Voor één **gelijkheidsbeperking** geldt de eigenschap dat als  $x^*$  een lokale minimizer is en  $\nabla g(x^*) \neq 0$  er een  $\lambda \in \mathbb{R}$  bestaat zo dat  $-\nabla f(x^*) = \lambda \nabla g(x^*)$

Hiermee kunnen kandidaat minima gevonden worden door het volgende stelsel op te lossen met de methode van Newton-Raphson:

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \lambda \nabla g(x) = 0 \\ g(x) = 0 \end{cases}$$

Voor **meerdere gelijkheidsbeperkingen** geldt de eigenschap dat als  $x^*$  een lokale minimizer is en de vectoren

$$\nabla g_1(x^*), \dots, \nabla g_p(x^*)$$

zijn lineair onafhankelijk, dan bestaan er  $\lambda_1, \dots, \lambda_p \in \mathbb{R}$  zo dat

$$-\nabla f(x^*) = \sum_{i=1}^p \lambda_i \nabla g_i(x^*)$$

Hiermee kunnen kandidaat minima gevonden worden door het volgende stelsel op te lossen met de methode van Newton-Raphson:

$$\begin{cases} \nabla f(x) + \sum_{i=1}^p \lambda_i \nabla g_i(x) = 0 \\ g_1(x) = 0 \\ \dots \\ g_p(x) = 0 \end{cases}$$

### 3.2.2 Ongelijkheidsbeperkingen

TODO

## 4 Trigonometrische benadering

### 4.1 Fourier-analyse

Een Fourier-transformatie stelt een functie, die origineel in het tijdsdomein werd voorgesteld, voor in het frequentiedomein. Afhankelijk van de situatie onderscheiden we de volgende Fourier-transformaties:

1. **Continue Fourier-transformatie** wanneer  $x(t)$  gedefinieerd voor  $t \in (-\infty, \infty)$ .
2. **Fourier-reeksontwikkeling** wanneer  $x(t)$  gedefinieerd is op een compact interval  $[a, b]$ .
3. **Discrete Fourier-transformatie** wanneer  $x(t)$  bemonsterd op een eindig aantal equidistante tijdstippen.
4. **Z-transformatie** wanneer  $x(t)$  bemonsterd op een oneindig aantal equidistante tijdstippen.

### 4.2 Discrete Fourier-transformatie

#### 4.2.1 DFT en IDFT

**Definitie 10** Voor een eindige rij  $\{x_n\}_{n=0}^{N-1}$  met  $N$  willekeurige getallen wordt de discrete Fourier-transformatie (DFT) gegeven door

$$X_k = \sum_{n=0}^{N-1} x_n W_N^{kn}$$

voor  $k = 0, \dots, N-1$  met

$$W_N = e^{2\pi i/N}$$

**Definitie 11** Voor een eindige rij  $\{X_k\}_{k=0}^{N-1}$  met  $N$  willekeurige getallen wordt de inverse discrete Fourier-transformatie (IDFT) gegeven door

$$x_n = \sum_{k=0}^{N-1} X_k W_N^{-kn}$$

voor  $n = 0, \dots, N-1$  met

$$W_N = e^{2\pi i/N}$$

Uit de eigenschap dat  $W_N^{k+N} = W_N^k$  volgt dat er slechts  $N$  verschillende  $W_N^{kn}$  en  $W_N^{-kn}$  zijn.

**Complexiteit van directe berekening:**  $\mathcal{O}(N^2)$

#### 4.2.2 Daniel-Lanczos splitsingsalgoritme

Vanwege de eigenschappen  $W_N^{N/2+k} = -W_N^k$ ,  $X_{N/2+k}^{even} = X_k^{even}$  en  $X_{N/2+k}^{odd} = X_k^{odd}$  geldt dat

$$X_k = X_k^{even} + W_N^k X_k^{odd}$$

---

#### Algorithm 7 Daniel-Lanczos Splitsingsalgoritme

---

- 1: **procedure** DFTSPLIT
  - 2:    $\{X_k^{even}\}_{k=0}^{N/2-1} = \{\sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n} W_{N/2}^k\}_{k=0}^{N/2-1}$
  - 3:    $\{X_k^{odd}\}_{k=0}^{N/2-1} = \{\sum_{n=0}^{N/2-1} x_{2n+1} W_{N/2}^k\}_{k=0}^{N/2-1}$
  - 4:    $\{X_k\}_{k=0}^N = \{X_{k/2}^{even} + W_N^k X_{k/2}^{odd}\}_{k=0}^N$
- 

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(N^2/2)$

#### 4.2.3 Snelle Fourier-transformatie

Met de combinatiestap van het Daniel-Lanczos-splitsingsalgoritme kunnen we een recursief algoritme opstellen

---

#### Algorithm 8 Snelle Fourier-transformatie

---

- 1: **procedure** FFT
  - 2:   **if**  $N = 1$  **then**
  - 3:      $X_k = x_k$
  - 4:   **else**
  - 5:     reorder  $\{x_k\}$
  - 6:      $\{X_k\} = \{FFT(x_{k/2}^{even}) + W_N^k FFT(x_{k/2}^{odd})\}$
- 

**Complexiteit:**  $\mathcal{O}(N \log_2(N))$

## 4.3 Symmetrische discrete Fourier-transformaties

### 4.3.1 Discrete cosinustransformatie

De DFT van een rij met even symmetrie wordt gegeven door

$$X_k = 2 \sum_{n=0}^N x_n \cos(\pi kn/N)$$

Dit is een transformatie van de symmetrische rij en is verwant aan de discrete cosinustransformatie.

**Definitie 12** De discrete cosinustransformatie (DCT) wordt gedefinieerd als

$$X_k = \sum_{n=0}^N x_n \cos(\pi kn/N)$$

voor  $k = 0, \dots, N$

**Definitie 13** De inverse discrete cosinustransformatie (IDCT) wordt gedefinieerd als

$$x_n = \frac{2}{N} \sum_{k=0}^N X_k \cos(\pi kn/N)$$

voor  $n = 0, \dots, N$

### 4.3.2 Snelle cosinustransformatie

Om de cosinustransformatie efficiënt te berekenen, kan een algoritme gelijkaardig aan FFT worden.

FCT

---

**Algorithm 9** Snelle cosinustransformatie

---

- 1: **procedure** FCT
  - 2:
- 

### 4.3.3 Discrete sinustransformatie

De DFT van een rij met oneven symmetrie wordt gegeven door

$$X_k = 2i \sum_{n=1}^{N-1} x_n \sin(\pi kn/N)$$

Dit is een transformatie van de symmetrische rij en is verwant aan de discrete sinustransformatie.

wat is een  
oneven uit-  
breiding

**Definitie 14** De discrete sinustransformatie (DST) wordt gedefinieerd als

$$X_k = \sum_{n=1}^{N-1} x_n \sin(\pi kn/N)$$

voor  $k = 1, \dots, N-1$

**Definitie 15** De inverse discrete sinustransformatie (IDST) wordt gedefinieerd als

$$x_n = \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N-1} X_k \sin(\pi kn/N)$$

voor  $n = 1, \dots, N-1$

## 4.4 Meerdimensionele Fourier-transformatie

Deze sectie  
als er tijd  
over is

# 5 Toevalsgeneratoren

## 5.1 Genereren van willekeurige getallen

Een software-generator moet voldoen aan de volgende eigenschappen:

- snel en weinig geheugengebruik
- draagbaar over verschillende platformen
- voldoende lange periode
- reproduceerbare gegenereerde rij (bv. via seed)
- gegenereerde getallen voldoen aan eigenschappen van willekeurige getallen:

### 5.1.1 Lineaire congruentiële generator

**Definitie 16** Een lineaire congruentiële generator (LCG) met parameters  $(a, c, m)$  genereert getallen volgens de recursiebetrekking

$$X_{i+1} = (aX_i + c) \bmod m$$

waarin  $a$  de multiplier,  $c$  het increment en  $m$  de modulus.

Enkele keuzes voor  $(a, c, m)$  die een grote periode opleveren zijn de volgende (met  $b$  het aantal bits in een geheugenplaats en  $k \in \mathbb{Z}$ ):

- Voor  $m = 2^b$ ,  $c \neq 0$  is de maximale periode  $P = m = 2^b$ , die kan bereikt worden wanneer  $c$  relatief priem met  $m$  en  $a = 1 + 4k$ .
- Voor  $m = 2^b$ ,  $c = 0$  is de maximale periode  $P = m/4 = 2^{b-2}$ , die kan bereikt worden wanneer  $X_0$  oneven is en als  $a = 3 + 8k$  of  $a = 5 + 8k$ .

- Als  $m$  een priemgetal en  $c = 0$  is de maximale periode  $P = m - 1$ , die kan bereikt worden als  $a$  de eigenschap heeft dat de kleinste  $k$  waarvoor geldt dat  $a^k - 1$  deelbaar is door  $m$  gelijk is aan  $m - 1$

## 5.2 Testen voor toevalsgeneratoren

### 5.2.1 Chi-kwadraattest

De chi-kwadraattest is een frequentietest om na te gaan of de gegenereerde getallen voldoen aan de uniforme verdeling.

De chi-kwadraattest maakt gebruik van de toetsingsgrootheid

$$\chi_{n-1}^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(O_i - E_i)^2}{E_i}$$

met  $O_i$  het aantal observaties in klasse  $i$ ,  $E_i$  het verwachte aantal punten in klasse  $i$  en  $n$  het aantal klassen.

### 5.2.2 Kolmogorov-Smirnov-test

De Kolmogorov-Smirnov-test is een frequentietest om na te gaan of de gegenereerde getallen voldoen aan de uniforme verdeling.

---

#### Algorithm 10 Kolmogorov-Smirnovtest

---

```

1: procedure DFTSPLIT(KSTest)
2:    $R_{(1)} \leq \dots \leq R_{(N)} = \text{sort}(R_1, \dots, R_N)$ 
3:    $D^+ = \max_{1 \leq i \leq N} \{ \frac{i}{N} - R_{(i)} \}$ 
4:    $D^- = \max_{1 \leq i \leq N} \{ R_{(i)} - \frac{i-1}{N} \}$ 
5:    $D = \max(D^+, D^-)$ 
6:   if  $D > D_\alpha$  then
7:     reject  $H_0$ 
8:   else
9:     accept  $H_0$ 

```

---

### 5.2.3 Autocorrelatietest

Een autocorrelatietest vindt het onderling verband in een rij getallen.

Gekke wiskunde

## 5.3 Toevalsgeneratoren voor discrete verdelingen

**Definitie 17** Stel dat  $X$  een discrete willekeurige variabele is met cdf  $F$ . De inverse distributiefunctie (idf) van  $X$  is dan

$$F^* : [0, 1] \rightarrow \chi : u \mapsto F^*(u) = \min_x \{x : u < F(x)\}$$



Als  $U$  een uniform verdeelde willekeurige variabele is en  $F^*(x)$  de idf van  $F(x)$ , dan is een willekeurige variabele  $Z = F^*(U)$  verdeeld volgens  $F$

## 5.4 Toevalsgeneratoren voor continue verdelingen

**Definitie 18** *Stel dat  $X$  een continue willekeurige variabele is met cdf  $F$ . De inverse distributiefunctie (idf) van  $X$  is dan*

$$F^{-1} : [0, 1] \rightarrow \mathcal{X} : u \mapsto F^{-1}(u) = \min_x \{x : u < F(x)\}$$

Het is niet altijd eenvoudig om een uitdrukking voor  $F^{-1}$  op te stellen. Daarom zijn er enkele methodes.

### 5.4.1 Transformatiemethode

Als  $U$  een uniform verdeelde willekeurige variabele is en  $F^{-1}(x)$  de idf van  $F(x)$ , dan is een willekeurige variabele  $Z = F^{-1}(U)$  verdeeld volgens  $F$

### 5.4.2 Box-Muller-algoritme

Het Box-Muller-algoritme wordt gebruikt om getallen volgens  $N(0, 1)$  te genereren.

---

**Algorithm 11** Box-Muller-algoritme

---

```

1: procedure BOXMULLERNORMAL
2:    $U_1, U_2 \sim U(0, 1)$  random
3:    $Z_1 = \sqrt{-2 \log(U_1)} \cos(2\pi U_2)$ 
4:    $Z_2 = \sqrt{-2 \log(U_1)} \sin(2\pi U_2)$ 

```

---

$Z_1$  en  $Z_2$  zijn onafhankelijke willekeurige variabelen verdeeld volgens  $N(0, 1)$

### 5.4.3 Som van Twaalf

Het Box-Muller-algoritme wordt gebruikt om getallen volgens  $N(0, 1)$  te genereren.

---

**Algorithm 12** Som van twaalf

---

```

1: procedure SUMOF12NORMAL
2:    $U_i \sim U(0, 1)$  for  $i = 1, 2, \dots, 12$ 
3:    $Z = \sum_{i=1}^{12} U_i - 6$ 

```

---

$Z$  is bij benadering verdeeld volgens  $N(0, 1)$

#### 5.4.4 Acceptance-rejection methode

De acceptance-rejection methode kan gebruikt worden om getallen volgens een willekeurige verdelingsfunctie  $p(x)$  te genereren, gegeven een andere verdelingsfunctie  $q(x)$  waar een generator voor bestaat.

In de praktijk wordt voor  $q(x)$  vaak  $U(0, 1)$  genomen.

---

**Algorithm 13** Acceptance-rejection methode

---

```
1: procedure ACCEPTREJECTRANDOM
2:    $Y \sim q(x)$  random
3:    $\hat{x} \in \text{dom}(p(x))$ 
4:   if  $0 < Y < p(\hat{x})/q(\hat{x})$  then
5:     accept
6:   else if  $p(\hat{x})/q(\hat{x}) < Y < 1$  then
7:     reject
```

---