

Wiskundige modellering in de ingenieurswetenschappen

Karel Van Acoleyen
karel.vanacoleyen@ugent.be

21 september 2024

"Let me end on a more cheerful note. The miracle of the appropriateness of the language of mathematics for the formulation of the laws of physics is a wonderful gift which we neither understand nor deserve. We should be grateful for it and hope that it will remain valid in future research and that it will extend, for better or for worse, to our pleasure, even though perhaps also to our bafflement, to wide branches of learning"

Eugene Paul Wigner, The Unreasonable Effectiveness of Mathematics in the Natural Sciences (1960)

*"You wanna know how to rhyme you better learn how to add
It's mathematics"*

Mos Def, Mathematics (1999)

Inhoudsopgave

1 Analyse in één veranderlijke: enkele aspecten	1
1.1 Continuïteitseigenschappen van functies	1
1.2 Taylorontwikkeling	2
1.3 Twee eenvoudige differentiaalvergelijkingen	5
1.3.1 $y'(t) = \lambda y(t)$	5
1.3.2 $y''(t) = \lambda y(t)$	6
1.4 Complexe getallen	7
1.4.1 Basisdefinities	7
1.4.2 Polaire vorm en formule van Euler	8
1.4.3 Goniometrische formules	10
1.4.4 Hoofdstelling van de algebra	11
1.4.5 Toepassing: lichtgolven	11
2 Lineaire algebra	13
2.1 Vectoren	13
2.1.1 Vectorruimtes	13
2.1.2 Lineaire (on)afhankelijkheid, basis	14
2.1.3 Inproduct, norm, orthogonaliteit	15
2.2 Matrices	19
2.2.1 Kolomruimte, rijruimte en nulruimtes	21
2.2.2 Matrix inverse	24
2.2.3 Projectie en kleinste kwadrate benadering	25
2.3 Vierkante matrices	28
2.3.1 Determinant	28
2.3.2 Basistransformaties	32
2.3.3 Eigenvectoren, eigenwaarden, diagonalisatie en de Jordan-decompositie	33
2.3.4 Matrixmachten en iteratieve matrixvergelijkingen	37
2.3.5 Matrixexponent en lineaire differentiaalvergelijkingen	40
2.3.6 Toepassing: normale modes voor gekoppelde deeltjes	42
2.4 Symmetrische matrices	44
2.4.1 Orthogonale matrices en rotaties	45
2.5 Singuliere waardendecompositie	46
2.5.1 Toepassing: data-compressie via principal components	47
2.6 Complex vectorruimtes en matrices	48
2.6.1 Toepassing: de Jones-matrix voor optische elementen	50

2.6.2 Toepassing: 3D rotaties met Pauli-matrices (of quaternionen)	51
3 Integratie en afleiding in \mathbb{R}^n	55
3.1 Afleiding	55
3.1.1 De partieel afgeleide	55
3.1.2 De kettingregel	56
3.1.3 Coördinatentransformaties	57
3.1.4 De gradient en de differentiaal	59
3.1.5 Taylorreeks	61
3.2 Integratie	63
3.2.1 De Riemanniaanse integraal	63
3.2.2 Verandering integratievariabelen	69
3.2.3 Pool-, cilinder- en bolcoördinaten	70
4 Vectoranalyse in drie dimensies	73
4.1 Vectoren en vectorbewerkingen	73
4.1.1 Scalair product, norm en afstand	73
4.1.2 Vectoriel product	74
4.2 (Vector)velden en vectoriële afleiding	76
4.2.1 Vector- en scalaire velden: Maxwell en Navier-Stokes	76
4.2.2 The Fab Four: gradiënt, divergentie vectorveld, Laplacian, rotor	77
4.2.3 Nabla calculus	79
4.2.4 Conservatieve vectorvelden	81
4.2.5 Solenoïdale vectorvelden	83
4.2.6 De Helmholtz decompositie	84
4.3 Integratie	85
4.3.1 Lijnintegralen	86
4.3.2 Oppervlakteintegralen	90
4.4 Integratiestellingen	93
4.4.1 Stelling van Green en Stokes	93
4.4.2 Stelling van Gauss	98
4.4.3 Toepassing: continuïteitsvergelijking	101
5 Gewone lineaire differentiaalvergelijkingen	105
5.1 Definities en de gereduceerde lineaire DV	105
5.2 De complete lineaire DV	108
5.2.1 Beginvoorwaardenprobleem	109
5.3 Toepassing: de harmonische oscillator/ het RLC circuit	111
6 Fourier expansies	117
6.1 Fourier reeks	117
6.1.1 Convergentie-eigenschappen	119
6.1.2 Periodieke extensies en de Fouriercosinusreeks	122
6.2 De discrete Fouriertransformatie	123
6.2.1 Fast Fourier Transform (FFT)	127

7 Partiële differentiaalvergelijkingen	129
7.1 De warmte- en golfvergelijking	129
7.2 Fysische betekenis	130
7.3 Oplossing 1D warmtevergelijking	132
7.3.1 Voorbeeldoefening	136
7.4 Oplossing 1D golfvergelijking	139
7.5 2D golfvergelijking: de cirkelvormige drum	143
8 Integraaltransformaties	147
8.1 Fouriertransformatie	148
8.1.1 Definities en eigenschappen	148
8.1.2 Convolutietheorema	152
8.1.3 Fouriertransformatie van afgeleiden	153
8.2 Laplacetransformatie	155
8.2.1 Definitie en eigenschappen	155
8.2.2 De inverse Laplacetransformatie	158
8.2.3 Laplacetransformatie van afgeleiden	159

Hoofdstuk 1

Analyse in één veranderlijke: enkele aspecten

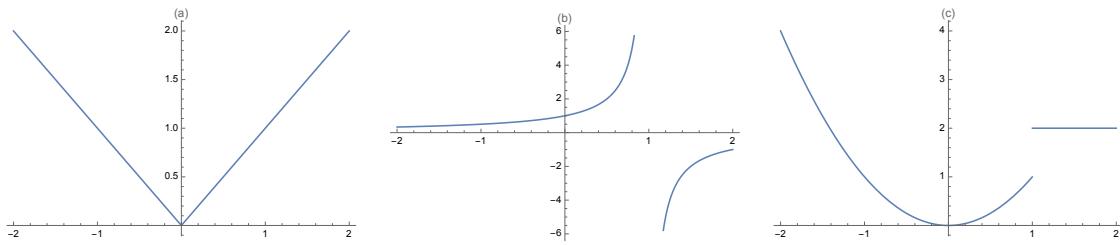
We behandelen hier enkele concepten en technieken uit de analyse in één veranderlijke die op zich interessant zijn, en die we ook nodig hebben voor het vervolg van de cursus. We veronderstellen dat de lezer reeds bekend is met concepten als de limiet $\lim_{x \rightarrow a} f(x)$ van een reële functie ($x \in \mathbb{R} \rightarrow f(x) \in \mathbb{R}$), noties als continuïteit, en zaken als afleiding en integratie van functies $f(x)$.

1.1 Continuïteitseigenschappen van functies

Functies vormen het alfa en omega van elke poging om een aspect van onze wereld op een kwantitatieve manier te beschrijven. Er bestaan functies in alle maten en gewichten, en het is dan ook nuttig om deze te klasseren volgens hun continuïteitseigenschappen, we frissen deze hier nog eens op. Een functie $f(x)$ zullen we **continu** noemen over een open interval $\Omega =]a, b[$ als ze 1)bestaat in elk punt van Ω (als er dus geen singulariteiten zijn) en als 2)haar limiet $\lim_{x \rightarrow x_0} f(x)$ voor elk punt $x_0 \in \Omega$ bestaat. Beschouwen we een gesloten of half-open interval, bvb. $\Omega = [a, b[$, dan hoeft op de randpunten die deel uitmaken van Ω enkel de binnenste limiet te bestaan, hier dan bvb. $\lim_{x \rightarrow a^+} f(x)$.

De continuïteitsklasse $\mathcal{C}^0(\Omega)$ is de verzameling van continue functies op Ω . Een functie $f(x)$ noemen we **continu afleidbaar** in Ω als ook haar afgeleide $\frac{df(x)}{dx}$ continu is in Ω , ze behoort dan tot $\mathcal{C}^1(\Omega)$. Bemerk dat $\mathcal{C}^1(\Omega) \subset \mathcal{C}^0(\Omega)$, de afgeleide van $f(x)$ kan alleen bestaan wanneer $f(x)$ continu is. Volledig analoog definiëren we verder dan **k maal continu afleidbare** functies als functies waarvoor de k -de afgeleide $\frac{d^k}{dx^k} f(x) \equiv f^{(k)}(x)$ continu is. En we hebben dan $\mathcal{C}^k(\Omega) \subset \mathcal{C}^{k-1}(\Omega) \subset \dots \mathcal{C}^0(\Omega)$. Functies waarvoor elke afgeleide bestaat en continu is noemen we **gladde functies**, met notatie $\mathcal{C}^\infty(\Omega)$ voor de functieklassen.

Deze definitie van functieklassen kan worden uitgebreid naar het **stuksgewijze geval**, waarbij de functies enkel de gestelde continuïteitseigenschappen hebben in een set van subintervallen Ω_i die Ω volledig bedekken: $\Omega_i = [x_{i-1}, x_i[, i = 1, \dots, n$, met $x_i < x_j$ voor $i < j$, $x_0 = a$ en $x_n = b$, zodat $\Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2 \cup \dots \cup \Omega_n$. We spreken



Figuur 1.1:

- (a) De functie $f(x) = |x|$: continu in \mathbb{R} , niet continu afleidbaar in \mathbb{R} , wel stuksgewijs continu afleidbaar in \mathbb{R} .
- (b) $f(x) = 1/(1-x)$: niet (stuksgewijs) continu in \mathbb{R} (want singulier in $x = 1$), glad in $]-\infty, 1[$ en in $]1, +\infty[$.
- (c) de functie $f(x) = \begin{cases} x^2 & x \leq 1 \\ 2 & x > 1 \end{cases}$: stuksgewijs glad in \mathbb{R} .

bvb. van een **stuksgewijs continue** functie, stuksgewijs continu afleidbare functie, enzovoort, t/m een stuksgewijs gladde functie.

Typisch, tenzij explicet anders vermeld, gebruiken en veronderstellen we in deze cursus functies die **voldoende braaf** zijn. Daarmee bedoelen we dan functies die voldoende afleidbaar zijn zodat er nergens pathologisch gedrag optreedt.

1.2 Taylorontwikkeling

Een typische strategie om een wiskundig modelleringsprobleem aan te pakken bestaat erin van de 'kleine' parameters te identificeren en dit te gebruiken om het probleem vereenvoudigd te benaderen. De berekening van de elasticiteitsleer vereenvoudigen bijvoorbeeld sterk wanneer we de vervorming $\Delta \vec{x}$ klein veronderstellen, waardoor we lineaire vergelijkingen krijgen. Een ander voorbeeld zijn de berekeningen uit kwantumelektrodynamica (QED), die steunen op het klein zijn van de fijnstructuurconstante α om tot voorspellingen voor een fysische grootheid $f(\alpha)$ (bijvoorbeeld de interactiesterkte van elektronen met een magneetveld) te komen in termen van een zogenaamde **reeksontwikkeling** voor de grootheid in kwestie:

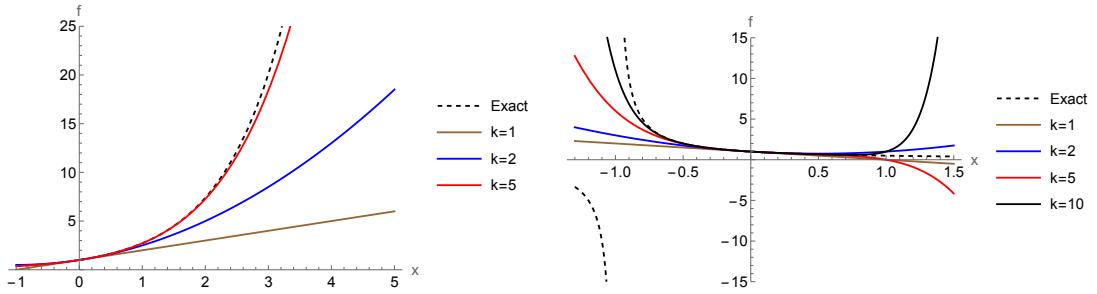
$$f(\alpha) = a_0 + a_1\alpha + a_2\alpha^2 + a_3\alpha^3 \dots, \quad (1.2.1)$$

waarbij de opeenvolgende termen steeds kleiner worden.

De rationale achter dergelijke benaderingen vinden we in:

de stelling van Taylor (die we hier geven zonder bewijs): *Voor een $k+1$ -maal continu afleidbare functie in een open interval $\Omega =]a, b[$ hebben we voor elk punt c en $x \in \Omega$ dat:*

$$f(x) = f(c) + (x - c)f'(c) + \frac{(x - c)^2}{2}f''(c) + \dots + \frac{(x - c)^k}{k!}f^{(k)}(c) + R_{k+1}(x) \quad (1.2.2)$$



Figuur 1.2: (a): Taylorbenaderingen voor $f(x) = e^x$, (b): Taylorbenaderingen voor $f(x) = 1/(1+x)$, hier zie je hoe de benaderingen inderdaad convergeren voor $-1 < x < 1$. Bemerk het singulier gedrag van de exacte functie voor $x = -1$ en het perfect reguliere gedrag voor $x = 1$.

waarbij

$$R_{k+1}(x) = \frac{(x - c)^{k+1}}{(k + 1)!} f^{(k+1)}(\xi(x)), \quad (1.2.3)$$

met $\xi(x)$ een punt gelegen tussen c en x , waarbij $k! = k(k - 1)(k - 2) \dots (3)(2)(1)$ (i.e. k faculteit) en $f^{(n)}(x) \equiv d^n f(x)/dx^n$.

De eerste $k+1$ termen in deze reeks geven ons de **Taylor-benadering tot op k -de orde**, en R_{k+1} noemen we de **restterm** (=de fout, die ook nog de Lagrangeslutterterm wordt genoemd) van deze benadering. Het punt c waarrond ontwikkeld wordt noemen we soms ook nog het **werkpunt**.

Opdat de Taylorbenadering zin heeft willen we natuurlijk dat de restterm R_{k+1} klein is, in het bijzonder willen voor gladde functies dat $\lim_{k \rightarrow \infty} R_k = 0$. In dat geval zal de volledige Taylorreeks convergeren naar de functie in kwestie:

$$f(x) = f(c) + (x - c)f'(c) + \frac{(x - c)^2}{2}f''(c) + \dots = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(x - c)^k}{k!} f^{(k)}(c). \quad (1.2.4)$$

Een functie $f(x)$ noemen we **analytisch** in $x = c$, wanneer de Taylorreeks convergeert rond c , i.e. wanneer er een interval $\Omega \ni c$ bestaat waarop de Taylorreeks convergeert. Bij het gebruiken van de Taylor-benadering gaan we er dus (meestal impliciet) vanuit dat de functie analytisch is in het punt waarrond ontwikkeld wordt. Bemerk dat desalniettemin de Taylorbenadering soms ook zin heeft indien de reeks niet convergeert, voor zogenaamde asymptotische reeksen (dit is bijvoorbeeld het geval voor de QED-machtreeksen in α).

Veel voorkomende Taylorreeksen (ga zelf deze uitdrukkingen na):

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots + \frac{x^n}{n!} + \dots \quad \text{convergeert voor } x \in \mathbb{R} \quad (1.2.5)$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} + \dots \quad \text{convergeert voor } x \in \mathbb{R} \quad (1.2.6)$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2} + \frac{x^4}{24} + \dots + (-1)^n \frac{x^{2n}}{(2n)!} + \dots \quad \text{convergeert voor } x \in \mathbb{R} \quad (1.2.7)$$

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + \dots + x^n + \dots \quad \text{convergeert voor } x \in]-1, 1[\quad (1.2.8)$$

$$\ln(1-x) = -(x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} + \dots + \frac{x^n}{n} + \dots) \quad \text{convergeert voor } x \in]-1, 1[\quad (1.2.9)$$

Toepassing: bepalen limieten. De Taylorbenadering komt ook van pas bij het bepalen van limieten. Neem bijvoorbeeld $\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x}$, waarbij dus zowel teller als nummer naar nul gaan. In laagste niet-triviale orde in x hebben we uit (1.2.2) dat $\sin x \approx \sin(0) + \cos(0)x = x$. Zo vinden we:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{x}{x} = 1. \quad (1.2.10)$$

Toepassing: storingsrekening. Elke perturbatieve berekening (of storingsrekening) vertrekt van het vooropstellen van een kleine parameter, waarna we een benadering voor de gezochte exacte uitdrukking in de vorm van een reeksontwikkeling in die parameter proberen te vinden. We passen dit later bij de oefeningen nog toe, ook verder in de cursus. Hier geven we volgend eenvoudig voorbeeld voor het benaderd oplossen van de vergelijking:

$$x^3 + \epsilon x = 1, \quad (1.2.11)$$

waarbij ϵ klein is, en waarbij je de oplossing $x = x_0(\epsilon)$ wil bepalen tot op tweede orde in ϵ . Voor $\epsilon = 0$ hebben we de unieke (reële) oplossing $x_0(0) = 1$. We stellen dan $x_0(\epsilon) \approx 1 + a_1\epsilon + a_2\epsilon^2$, waaruit $x_0(\epsilon)^3 \approx 1 + 3a_1\epsilon + (3a_1^2 + 3a_2)\epsilon^2$ (tot op tweede orde!). Dit geeft dan tot op tweede orde volgende vergelijking:

$$(1 + 3a_1\epsilon + (3a_1^2 + 3a_2)\epsilon^2) + \epsilon(1 + a_1\epsilon) = 1, \quad (1.2.12)$$

waaruit je door het identificeren van de coëfficiënten van $(1, \epsilon, \epsilon^2)$ dan vindt dat:

$$a_1 = -\frac{1}{3} \quad a_2 = 0, \quad (1.2.13)$$

of tot op tweede orde hebben we dat:

$$x_0(\epsilon) \approx 1 - \frac{\epsilon}{3}. \quad (1.2.14)$$

Toepassing: linearisatie differentiaalvergelijkingen. De Taylor expansie komt ook van pas bij het lineariseren van differentiaalvergelijkingen. Neem bijvoorbeeld de exacte niet-lineaire differentiaal vergelijking voor de slinger:

$$\theta''(t) = -\frac{g}{L} \sin(\theta(t)). \quad (1.2.15)$$

Deze vergelijking is moeilijk op te lossen in tegenstelling tot haar lineaire benadering die geldt voor kleine hoekafwijking θ , waarvoor we de Taylor benadering $\sin \theta \approx \theta$ invullen:

$$\theta''(t) = -\frac{g}{L}\theta(t). \quad (1.2.16)$$

Toepassing: eindige differentiebenaderingen voor afgeleiden. → zie het bord/werkcollege.

1.3 Twee eenvoudige differentiaalvergelijkingen

Later in de cursus gaan we het nog uitgebreider hebben over differentiaalvergelijkingen. Laat ons hier, in functie van wat dadelijk komt, al twee eenvoudige vergelijkingen bespreken.

1.3.1 $y'(t) = \lambda y(t)$

Deze vergelijking heeft als oplossing:

$$y(t) = y_0 e^{\lambda(t-t_0)}, \quad (1.3.17)$$

waarbij $y_0 = y(t_0)$ wordt bepaald door de beginvoorwaarde gesteld op $t = t_0$.

Inderdaad:

$$\frac{y'}{y} = \lambda \quad \rightarrow \quad \int_{t_0}^t dt' \frac{y'}{y} = \int_{t_0}^t dt' \frac{d \log y(t')}{dt'} = \log \left[\frac{y(t)}{y(t_0)} \right] = \lambda(t - t_0), \quad (1.3.18)$$

waaruit (1.3.17) volgt.

Toepassing: radioactief verval.

Een typische toepassing is radioactief verval. Het is vanuit de kwantumfysica principieel onmogelijk om te voorspellen wanneer een individuele radioactieve atoomkern zal vervallen. Men kan daarentegen wel zeggen wat de kans p is dat een kern die op een bepaald moment nog niet vervallen is, een kort tijdje Δt later wel vervallen zal zijn: $p = \lambda \Delta t$, met λ de vervalconstante. Voor het geval van een groot aantal radioactieve atomen $N(t)$ kunnen we zo via de wet van grote getallen opschrijven dat deze zullen afnemen volgens:

$$dN = -pN = -\lambda N dt, \quad (1.3.19)$$

ofwel:

$$N'(t) = \frac{dN}{dt} = -\lambda N(t). \quad (1.3.20)$$

Vraagje: Gegeven een radioactief element met vervalconstante λ , wat is de halfwaardetijd $t_{1/2}$? Hoe lang duurt het met andere woorden vooraleer de hoeveelheid radioactieve atomen gehalveerd is?

We hebben $N(t) = N_0 e^{-\lambda t}$, waaruit we vinden dat $N(t)/N_0 = 1/2$ voor $t_{1/2} = \log(2)/\lambda$.

1.3.2 $y''(t) = \lambda y(t)$

Hier onderscheiden we drie gevallen:

- $\lambda > 0$

In dit geval leest de meest algemene oplossing (je gaat makkelijk na dat dit een oplossing is, later tonen we aan dat dit ook de meest algemene oplossing is):

$$y(t) = A e^{\sqrt{\lambda}t} + B e^{-\sqrt{\lambda}t}, \quad (1.3.21)$$

waarbij de constanten A en B worden bepaald door twee beginvoorwaarden.

- $\lambda = 0$

In dit geval krijgen we:

$$y(t) = A + Bt \quad (1.3.22)$$

- $\lambda < 0$

In dit geval leest de meest algemene oplossing:

$$y(t) = A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t), \quad (1.3.23)$$

waarbij de **hoekfrequentie** $\omega = \sqrt{-\lambda}$. We krijgen dus een periodieke oplossing $y(t) = y(t + T)$, met periode $T = \frac{2\pi}{\omega}$ of frequentie $f = \omega/(2\pi)$.

Via $\cos(x+y) = \cos(x)\cos(y) - \sin(x)\sin(y)$ kan deze oplossing ook nog worden geschreven als:

$$y(t) = C \cos(\omega t + \alpha), \quad (1.3.24)$$

voor constanten C ('de amplitude') en α ('de fase').

Toepassing: de slinger. We beschouwen de slinger voor kleine hoekafwijking θ , waarbij we de slinger op $t = 0$ in rust loslaten met een initiële afwijking θ_0 . Om $\theta(t)$ te bepalen willen we dus (zie (1.2.16)):

$$\theta''(t) = -\frac{g}{L} \theta(t), \quad (1.3.25)$$

oplossen met beginvoorwaarden $\theta(0) = \theta_0$ en $\theta'(0) = 0$. We vinden dan:

$$\theta(t) = \theta_0 \cos\left(\sqrt{\frac{g}{L}}t\right). \quad (1.3.26)$$

De slinger slingert dus met periode $T = 2\pi\sqrt{L/g}$, onafhankelijk van de amplitude θ_0 . Dit is de beroemde waarneming van Galilei, die hiermee volgens de overlevering mee de wetenschappelijke revolutie van de 17de eeuw in gang zette. Het was echter nog even wachten op de zwaartekrachtwetten van Newton en de calculus van Leibniz en diezelfde Newton om dit fenomeen ook af te leiden, zoals wij hier deden.

1.4 Complexe getallen

Tot slot geven we in dit inleidend hoofdstuk nog een korte herhaling van enkele eigenschappen van complexe getallen.

1.4.1 Basisdefinities

Een complex getal $z \in \mathbb{C}$ heeft de vorm

$$z = a + ib, \quad a, b \in \mathbb{R}. \quad (1.4.27)$$

Hierbij zijn

$$\begin{aligned} a &= \operatorname{Re}(z) \\ b &= \operatorname{Im}(z) \end{aligned} \quad (1.4.28)$$

het reëel en imaginair deel.

Het optellen, vermenigvuldigen, enz., gedraagt zich verder net als bij de reële getallen (\mathbb{C} is een veld, zie <https://nl.wikipedia.org/>). Waarbij we stellen dat:

$$\boxed{i^2 = -1} \quad (1.4.29)$$

- **de optelling:**

$$(a + ib) + (c + id) = (a + c) + i(b + d). \quad (1.4.30)$$

- **de vermenigvuldiging** (door toepassing van distributiviteit, $(A+B) \times (C+D) = AC + AD + BC + BD$):

$$(a + ib)(c + id) = (ac - bd) + i(ad + bc). \quad (1.4.31)$$

- **de inverse:**

$$(a + ib)^{-1} = \frac{a - ib}{a^2 + b^2}. \quad (1.4.32)$$

Inderdaad, er geldt

$$(a + ib)^{-1}(a + ib) = \frac{(a - ib)(a + ib)}{a^2 + b^2} = \frac{a^2 + b^2}{a^2 + b^2} = 1. \quad (1.4.33)$$

Verder hebben we nog een aantal specifieke definities voor \mathbb{C} :

- **de complex toegevoegde:**

We noteren de complex toegevoegde van z als \bar{z} , gedefinieerd door:

$$\bar{z} = a - ib, \quad \text{als } z = a + ib. \quad (1.4.34)$$

Zo kunnen we bijvoorbeeld (1.4.32) herschrijven als:

$$z^{-1} = \frac{\bar{z}}{z\bar{z}} \quad (1.4.35)$$

Bemerk ook dat:

$$Re(z) = \frac{1}{2}(z + \bar{z}) \quad \text{en} \quad Im(z) = \frac{-i}{2}(z - \bar{z}). \quad (1.4.36)$$

- **de modulus:**

Deze noteren we als $|z|$ met als definitie:

$$|z| = \sqrt{(z\bar{z})}, \quad (1.4.37)$$

of concreet

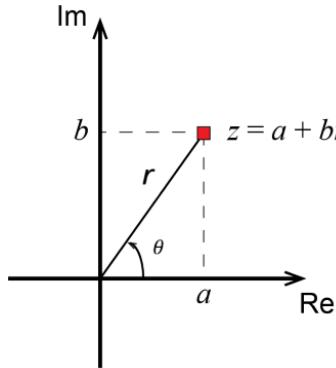
$$|a + ib| = \sqrt{a^2 + b^2} \geq 0. \quad (1.4.38)$$

Bewijs zelf als oefening dat de modulus multiplicatief is. Dit wil zeggen dat

$$|z\mu| = |z||\mu|, \quad \forall z, \mu \in \mathbb{C}. \quad (1.4.39)$$

1.4.2 Polaire vorm en formule van Euler

Aangezien er een bijectief verband bestaat tussen complexe getallen $z = a + ib$ en koppels reële getallen (a, b) , kunnen we een complex getal grafisch voorstellen als een punt in het vlak \mathbb{R}^2 (zie fig. 1.3). De meetkundige betekenis van de complexe toegevoeging is dan die van een spiegeling tegenover de X -as. Verder leidt deze grafische interpretatie van complexe getallen tot een nieuwe voorstellingswijze, de zogenaamde *polaire vorm* van een complex getal (fig. 1.3). Inderdaad, een complex getal $z = a + ib$ is uniek gekarakteriseerd door zijn modulus $r = |z| \in \mathbb{R}^+$ en de poolhoek $\theta \in [0, 2\pi[$ als $z \neq 0$.

Figuur 1.3: De polaire vorm van een complex getal z .

De poolhoek definiëren we als de hoek ingesloten door z en de positieve X -as. Hierdoor kunnen we dus schrijven:

$$\begin{aligned} z &= a + ib \\ &= r \cos \theta + ir \sin \theta \end{aligned} \tag{1.4.40}$$

of

$$\begin{aligned} a &= r \cos \theta \\ b &= r \sin \theta. \end{aligned} \tag{1.4.41}$$

Laten we nu het product van twee complexe getallen

$$\begin{aligned} z &= r(\cos \alpha + i \sin \alpha) \\ \mu &= s(\cos \beta + i \sin \beta) \end{aligned} \tag{1.4.42}$$

uitdrukken met behulp van hun polaire vorm. We vinden

$$\begin{aligned} z\mu &= rs (\cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta + i(\cos \alpha \sin \beta + \sin \alpha \cos \beta)) \\ &= rs ((\cos(\alpha + \beta) + i \sin(\alpha + \beta))) \end{aligned} \tag{1.4.43}$$

of met andere woorden we moeten de moduli vermenigvuldigen en de poolhoeken bij elkaar optellen. Deze regel kan ook worden gezien als een gevolg van de **formule van Euler**:

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \tag{1.4.44}$$

die geldt voor elk reëel getal x .

Om dit te bewijzen beschouwen we de functie

$$f(x) = e^{-ix}(\cos x + i \sin x), \tag{1.4.45}$$

dan volstaat het te bewijzen dat $f(x) = 1$. We berekenen de afgeleide van $f(x)$:

$$f'(x) = -ie^{-ix}(\cos x + i \sin x) + e^{-ix}(-\sin x + i \cos x) = 0 \tag{1.4.46}$$

waaruit we mogen besluiten dat $f(x)$ inderdaad constant is. Deze constante kunnen we bepalen door $f(0)$ uit te rekenen:

$$f(0) = e^{-i0}(\cos 0 + i \sin 0) = 1, \quad (1.4.47)$$

waarmee het bewijs compleet is \square .

Opmerking: Er bestaan verschillende alternatieve bewijzen van dit resultaat. Zo kan men bijvoorbeeld elke optredende functie vervangen door haar Taylorreeks, wat ook de identiteit oplevert. We laten dit als **oefening**.

We kunnen nu uiteindelijk de polaire vorm van z herschrijven als

$$\boxed{z = r(\cos \theta + i \sin \theta) = re^{i\theta}}, \quad (1.4.48)$$

wat bijvoorbeeld de **vermenigvuldiging** van $z = re^{i\theta}$ en $\mu = se^{i\psi}$ reduceert tot

$$z\mu = rse^{i(\theta+\psi)} \quad (1.4.49)$$

wegens de eigenschappen van de exponentiële functie.

1.4.3 Goniometrische formules

Vele goniometrische identiteiten zitten vervat in de polaire vorm.

Uit

$$e^{ix} = \cos x + i \sin x \quad (1.4.50)$$

en

$$e^{-ix} = \cos x - i \sin x \quad (1.4.51)$$

vinden we dat

$$\begin{aligned} \cos x &= \frac{e^{ix} + e^{-ix}}{2} \\ \sin x &= \frac{e^{ix} - e^{-ix}}{2i}. \end{aligned} \quad (1.4.52)$$

Zo kunnen we nu bijvoorbeeld de beroemde formule van De Moivre neerschrijven. Deze formule zegt, voor $n \in \mathbb{N}$, dat

$$\cos nx + i \sin nx = (\cos x + i \sin x)^n \quad (1.4.53)$$

wat onmiddellijk volgt uit de formule van Euler.

Uit het gelijkstellen van reëel, resp. imaginair deel van linker- en rechterlid in de formule van De Moivre volgen belangrijke goniometrische identiteiten. Inderdaad, neem bijvoorbeeld $n = 2$. Dan volgt uit De Moivre

$$\begin{aligned} \cos 2x &= \cos^2 x - \sin^2 x \\ \sin 2x &= 2 \sin x \cos x. \end{aligned} \quad (1.4.54)$$

1.4.4 Hoofdstelling van de algebra

Een van de belangrijkste redenen voor het invoeren van complexe getallen is de toepassing bij het oplossen van veeltermvergelijkingen. Dit resultaat wordt vaak de hoofdstelling van de algebra genoemd, en kan als volgt geformuleerd worden:

Hoofdstelling algebra: *Elke veelterm van graad n in de complexe veranderlijke z waarbij $a_j \in \mathbb{C}$ en $a_n \neq 0$, kan ontbonden worden in precies n factoren als*

$$P(z) = a_n z^n + a_{n-1} z^{n-1} + \dots + a_1 z + a_0 \quad (1.4.55)$$

waarbij $a_j \in \mathbb{C}$ en $a_n \neq 0$, kan ontbonden worden in precies n factoren als

$$P(z) = a_n(z - z_1)(z - z_2) \dots (z - z_n). \quad (1.4.56)$$

Hierbij zijn de complexe getallen z_j de nulpunten of wortels van $P(z)$.

Een eenvoudig voorbeeld van een veelterm die niet in factoren kan ontbonden worden over de reële getallen, maar wel over de complexe getallen is

$$z^2 + 1 = (z - i)(z + i). \quad (1.4.57)$$

Voor de wortels van de algemene kwadratische vergelijking

$$az^2 + bz + c = 0, \quad (1.4.58)$$

hebben we de gekende uitdrukking

$$z_1 = \frac{-b + \sqrt{D}}{2a} \quad z_2 = \frac{-b - \sqrt{D}}{2a}, \quad (1.4.59)$$

met de discriminant $D = b^2 - 4ac$. Bemerkt dat, in het geval van reële coëfficiënten, voor $D > 0$ de wortels reëel zijn, en we voor $D < 0$ hebben dat $z_2 = \overline{z_1}$. Ook voor de wortels van algemene derde graads en vierde graads veeltermvergelijkingen bestaan er (weliswaar redelijk ingewikkelde) algebraïsche uitdrukkingen, dit is niet langer het geval voor algemene hogere n -de graadsvergelijkingen ($n \geq 5$).

Algemeen zal blijven gelden dat voor het geval van reële coëfficiënten, complexe wortels in paren voorkomen. Inderdaad voor $a_i \in \mathbb{R}$ hebben we dat $\overline{P(z)} = P(\bar{z})$, zodat indien z_k een wortel is ($P(z_k) = 0$), dit ook het geval is voor \bar{z}_k .

1.4.5 Toepassing: lichtgolven

Wegens de Euler formule verschijnen complexe getallen op een natuurlijke manier bij de uitdrukking van reële (!) golven. Zo hebben we (met $C = A \exp^{i\alpha}$ een complexe constante):

$$f(t, x) = \frac{C}{2} \exp^{i(kx - \omega t)} + c.t. = A \cos(kx - \omega t + \alpha), \quad (1.4.60)$$

waarbij 'c.t.' staat voor complex toegevoegde, zodat we inderdaad een reële functie $f(t, x)$ krijgen. Deze uitdrukking beschrijft een vlakke golf die beweegt in de x -richting, met *amplitude* A , *fase* α , *golflengte* $\lambda = 2\pi/k$, *frequentie* $f = \omega/(2\pi)$ en snelheid $v = f\lambda$. (Ga zelf na dat dit inderdaad de juiste uitdrukkingen zijn voor λ , f en v .)

12HOOFDSTUK 1. ANALYSE IN ÉÉN VERANDERLIJKE: ENKELE ASPECTEN

Een ietwat meer geavanceerde toepassing is de uitdrukking voor lichtgolven. Zo volgt uit de Maxwell-vergelijkingen de volgende uitdrukking volgt voor het elektrisch veld \vec{E} voor een vlakke monochromatische lichtgolf met golflengte λ die propageert in de z -richting:

$$\vec{E}(z, t) = (E_x, E_y, E_z)(z, t) = \frac{E_0}{2} \vec{\epsilon} e^{ik(z-ct)} + \text{c.t.} \quad (1.4.61)$$

Hier is E_0 een reëel getal dat de amplitude bepaalt, $k = (2\pi)/\lambda$, c is de lichtsnelheid en $\vec{\epsilon}$ is een **complexe polarisatievector**:

$$\vec{\epsilon} = (\epsilon_1, \epsilon_2, 0), \quad (1.4.62)$$

met ϵ_i complexe getallen, met de voorwaarde dat $|\epsilon_1|^2 + |\epsilon_2|^2 = 1$.

Je kan nu vooreerst aantonen (**oefening**) dat deze voorwaarde volgende algemene vorm impliceert:

$$\vec{\epsilon} = (re^{i\alpha}, \sqrt{1-r^2}e^{i\beta}, 0) \quad (\text{met } r \leq 1). \quad (1.4.63)$$

Verder kan je dan narekenen dat dit de volgende uitdrukking voor de elektrische velden impliceert:

$$\vec{E} = E_0(r \cos[k(z-ct) + \alpha], \sqrt{1-r^2} \cos[k(z-ct) + \beta], 0) \quad (1.4.64)$$

Speciale keuzes voor de polarisaties zijn nu: $\vec{\epsilon} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$, in dat geval hebben we lineair gepolariseerd licht (met \vec{E} volgens de richting $\vec{e}_\theta = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$). Een andere bijzondere keuze is $\vec{\epsilon} = (1, \pm i, 0)/\sqrt{2}$, in dit geval hebben we rechts- of linksdraaiend circulair gepolariseerd licht, naargelang we de $-$ of de $+$ nemen.

Hoofdstuk 2

Lineaire algebra

2.1 Vectoren

2.1.1 Vectorruimtes

Lineaire algebra is in se de wiskunde van matrices en vectoren. Vanuit standaard meetkunde in 3D hebben we reeds een intuïtief beeld van vectoren als pijlen tussen twee punten in de Euclidische 3D ruimte. Nemen we bijvoorbeeld de punten P en Q met cartesische coördinaten (p_1, p_2, p_3) en (q_1, q_2, q_3) dan associeren we daaraan een zogenaamde plaatsvector $\vec{v} = (p_1 - q_1, p_2 - q_2, p_3 - q_3)$. Deze vector leeft dan in de vectorruimte \mathbb{R}^3 van alle mogelijke 3-tuples (v_1, v_2, v_3) . Verder is het ook duidelijk dat wanneer \vec{v} en \vec{u} element zijn van \mathbb{R}^3 dat dit dan ook geldt voor elke mogelijke lineaire combinatie:

$$\vec{w} = a\vec{u} + b\vec{v} = (au_1 + bv_1, au_2 + bv_2, au_3 + bv_3), \quad (2.1.1)$$

met a en b reële getallen.

Dé definiërende eigenschap van een **algemene vectorruimte** V over een veld K is precies dit: voor elke $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in V$ en elke $a, b \in K$ zal ook de **lineaire combinatie** $a\mathbf{u} + b\mathbf{v}$ een element zijn van V . Verder bezit ook elke vectorruimte één unieke **nulvector** $\mathbf{0}$, waarvoor geldt dat $\mathbf{u} = \mathbf{u} + \mathbf{0}$.¹ Ook moeten de optelling van vectoren en de vermenigvuldiging met elementen uit K nog voldoen aan een aantal eigenschappen als commutativiteit, assosiativiteit, en distributiviteit (zie <https://nl.wikipedia.org/wiki/Vectorruimte> voor de volledige definitie), welke automatisch voldaan zijn voor de standaard-optelling en vermenigvuldiging met $K = \mathbb{R}$ of $K = \mathbb{C}$ die we in deze cursus hanteren.

In het bovenstaande voorbeeld is $V = \mathbb{R}^3$ en $K = \mathbb{R}$ en is $\mathbf{0} = (0, 0, 0)$. Indien $K = \mathbb{R}$ dan spreken we over een reële vectorruimte. Verdere voorbeelden van reële vectorruimtes zijn \mathbb{R}^n , i.e. de verzameling van n -tuples $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n)$, maar bijvoorbeeld ook de vectorruimte $\mathbb{R}^{m \times n}$ van reële $(m \times n)$ matrices \mathbf{A} , die we zometeen zullen tegenkomen.

Een ander, misschien minder voor de hand liggend voorbeeld, dat we later in de

¹In de cursus zal de pijltjesnotatie \vec{v} enkel slaan op vectoren uit \mathbb{R}^3 , algemene vectoren \mathbf{v} en matrices \mathbf{A} zetten we in het vet.

cursus zullen tegenkomen, zijn de oplossingen $y(t)$ van homogene lineaire differentiaalvergelijkingen. Inderdaad, wanneer $y_1(t)$ en $y_2(t)$ oplossing zijn van dezelfde lineaire homogene vergelijking, dan geldt dit ook voor elke lineaire combinatie $a_1y_1(t) + a_2y_2(t)$. Concreter, voor een specifieke differentiaalvergelijking: zowel $y_1(t) = \cos(\omega t)$ als $y_2(t) = \sin(\omega t)$ zijn oplossingen van de differentiaalvergelijking $y''(t) + \omega^2 y(t) = 0$, en dit geldt ook voor elke lineaire combinatie. Nog een voorbeeld is de ruimte van kwadratisch integreerbare functies L^2 over een bepaald interval (i.e. de ruimte van functies $f(x)$ waarvoor de integraal $\int_b^a dx f(x)^2$ bestaat voor een bepaald interval $[a, b]$). Dit is opnieuw een vectorruimte want elke lineaire combinatie van kwadratisch integreerbare functies is eveneens kwadratisch integreerbaar.

2.1.2 Lineaire (on)afhankelijkheid, basis

Een stel vectoren $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$ is **lineair onafhankelijk** wanneer

$$\sum_{i=1}^k a_i \mathbf{v}_i = \mathbf{0} \iff a_1, a_2, \dots, a_k = 0, \quad (2.1.2)$$

of in woorden: wanneer er geen niet-triviale lineaire combinatie bestaat die de nulvector geeft.

Dit impliceert ook (zoals je makkelijk kan aantonen) dat van een stel lineaire onafhankelijke vectoren er geen enkele vector \mathbf{v}_i kan geschreven worden als een lineaire combinatie van de andere vectoren. Algemeen kan elk stel vectoren $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$ worden opgesplitst in een stel van k lineair onafhankelijke vectoren en een stel van $n - k$ **lineair afhankelijke** vectoren, waarbij deze laatste wél kunnen worden geschreven als een lineaire combinatie van de eerste. Deze opsplitsing is niet uniek bepaald, het aantal vectoren in elk stel is dat echter wel.

Voorbeeld: beschouw de drie vectoren (we gebruiken hier al de kolom-notatie voor vectoren)

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad (2.1.3)$$

dan vormen zowel $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$, als $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3\}$, als $\{\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$ een stel van 2 lineair onafhankelijke vectoren, waarbij de derde vector telkens een lineaire combinatie is.

De **span**² van een stel vectoren, $\text{span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$, definiëren we als de vectorruimte bestaande uit alle vectoren \mathbf{w} die kunnen geschreven worden als een lineaire combinatie van deze vectoren, $\mathbf{w} = \sum_{i=1}^n a_i \mathbf{v}_i$.³ We spreken ook over de vectorruimte

²Dit is de verEngelste term, in het Nederlands spreekt men ook over het lineair omhulsel, of het lineair opspansel.

³Dit is inderdaad een vectorruimte: als \mathbf{u}_1 en \mathbf{u}_2 er element van zijn, dan is dit ook het geval voor elke lineaire combinatie $\mathbf{w} = a\mathbf{u}_1 + b\mathbf{u}_2$.

opgespannen door $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$. Een **basis** voor een vectorruimte V is een stel lineaire onafhankelijke vectoren $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k\}$ die de gehele vectorruimte opspant. De **dimensie** van een vectorruimte is het aantal basisvectoren. Stel dat het gaat over vectoren \mathbf{v}_i uit \mathbb{R}^m , en $k < m$, dan is $V \subset \mathbb{R}^m$ een k -dimensionele **deelvectorruimte** (ook nog: subruimte) van \mathbb{R}^m . Bemerkt dat noodzakelijkerwijs $k \leq m$, het maximaal aantal lineaire onafhankelijke \mathbb{R}^m vectoren in een stel is m , in het geval van de gelijkheid $k = m$ hebben we uiteraard $V = \mathbb{R}^m$.

Voorbeeld: Gaan we terug naar het voorbeeld (2.1.3) van zojuist, dan is $\text{span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\} = \text{span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\} = \text{span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_3\} = \text{span}\{\mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3\}$, en vormt dus elk stel van twee vectoren \mathbf{v}_i een basis van deze 2-dimensionale reële deelvectorruimte van \mathbb{R}^3 . Een 2-dimensionale vectorruimte noemen we algemeen ook een vlak.

Voorbeeld: De functies $\mathbf{v}_1 = \cos \omega x$ en $\mathbf{v}_2 = \sin \omega x$ spannen de 2-dimensionale vectorruimte op van oplossingen van $y''(x) + \omega^2 y(x) = 0$. Inderdaad voor een algemene oplossing hebben we $y(x) = a\mathbf{v}_1 + b\mathbf{v}_2$. Dit is een deelvectorruimte van de oneindig dimensionale vectorruimte van reële functies.

2.1.3 Inproduct, norm, orthogonaliteit

Voor vectorruimtes definiëren we ook een inproduct van vectoren, die twee vectoren \mathbf{u} en \mathbf{v} afbeelden op een getal. De voor de hand liggende keuze voor de reële vectorruimtes \mathbb{R}^n is het **Euclidisch inproduct**:

$$\boxed{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^n u_i v_i}. \quad (2.1.4)$$

Dit inproduct beeldt inderdaad twee vectoren af op een reëel getal (=hun inproduct). Wij gebruiken hier de 'dot' notatie, een andere notatie voor het inproduct die je soms zal terugvinden is de 'braket' notatie $\langle u, v \rangle$. In de volgende sectie zullen we het Euclidisch inproduct ook nog herschrijven als $\mathbf{u}^T \mathbf{v}$.

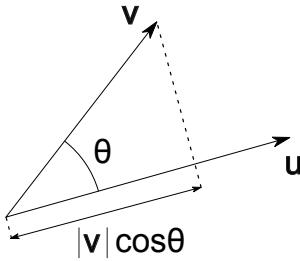
Bij het inproduct hoort ook een **norm**:

$$\boxed{\|\mathbf{u}\| = \sqrt{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}} = \sqrt{u_1^2 + u_2^2 + \dots + u_n^2}}. \quad (2.1.5)$$

Dit laat ons toe van de hoek θ tussen twee vectoren te definiëren (op een teken na) als:

$$\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{\|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|} = \cos \theta. \quad (2.1.6)$$

Bemerkt dat deze definitie inderdaad overeenkomt met wat we kennen uit de driehoeksmeetkunde (zie fig. 2.1). Het feit dat $-1 \leq \cos \theta \leq 1$ is een direct gevolg van de



Figuur 2.1: Het inproduct van \mathbf{u} en \mathbf{v} = het product van de norm van \mathbf{u} en de norm van de projectie van \mathbf{v} op \mathbf{u} (of vice versa).

Cauchy-Schwarz ongelijkheid waaraan elke goed gedefinieerde norm moet voldoen:

$$|\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}| \leq \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|. \quad (2.1.7)$$

Hieruit bewijs je ook makkelijk de **driehoeksongelijkheid**:

$$\|\mathbf{u} + \mathbf{v}\| \leq \|\mathbf{u}\| + \|\mathbf{v}\|. \quad (2.1.8)$$

Twee vectoren noemen we **orthogonaal** wanneer hun inproduct verdwijnt: $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = 0$. Het is in veel gevallen handig van te werken met een zogenaamde **orthonormale basis**. Dit is een basis $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ waarvan al de vectoren orthogonaal zijn ten opzichte van elkaar, en waarvan de vectoren norm 1 hebben:

$$\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j = \delta_{ij}, \quad (2.1.9)$$

hier introduceerden we het **Kronecker-delta symbool**, gedefinieerd door:

$$\begin{aligned} \delta_{ij} &= 0 \quad \text{voor } i \neq j \\ \delta_{ij} &= 1 \quad \text{voor } i = j. \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Gramm-Schmidt:

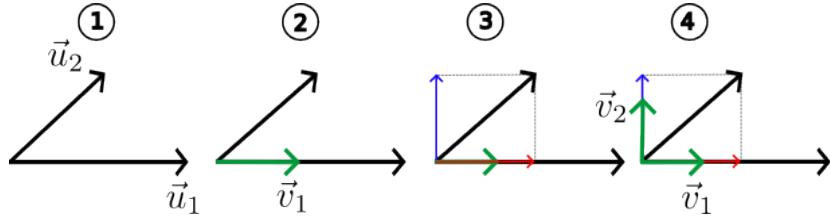
Voor elke vectorruimte kan je een orthonormale basis kiezen: elke willekeurige basis $\{\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_k\}$ kan je omvormen tot een orthonormale basis $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ door het nemen van gepaste lineaire combinaties. De Gramm-Schmidt procedure geeft ons hiervoor een algoritme. Dit gaat als volgt:

Stap 1: neem de eerste vector \mathbf{u}_1 en definieer:

$$\mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{u}_1}{\|\mathbf{u}_1\|}. \quad (2.1.11)$$

\mathbf{u}_2 kunnen we nu ontbinden in een parallelle en orthogonale component ten opzichte van \mathbf{v}_1 :

$$\mathbf{u}_2 = (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{u}_2) \mathbf{v}_1 + (\mathbf{u}_2 - (\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{u}_2) \mathbf{v}_1) \equiv \mathbf{u}_2^{\parallel} + \mathbf{u}_2^{\perp}, \quad (2.1.12)$$



Figuur 2.2: Gram-Schmidt orthogonalisatie. (1): de twee vectoren \mathbf{u}_1 en \mathbf{u}_2 , (2): bepaling van eenheidsvector \mathbf{v}_1 (groen) in richting van \mathbf{u}_1 , (3): ontbinding van \mathbf{u}_2 in evenwijdige (rood) en orthogonale (blauw) component ten opzichte van \mathbf{v}_1 , (4): bepaling van eenheidsvector \mathbf{v}_2 (groen) in richting van \mathbf{u}_2^\perp .

je kan controleren dat inderdaad $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{u}_2^\parallel = \mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{u}_2$ en $\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{u}_2^\perp = 0$. We noemen \mathbf{u}_2^\parallel ook nog de projectie op de vectorruimte (in casu een rechte) opgespannen door \mathbf{v}_1 . Voor stap 2 definiëren we dan:

$$\mathbf{v}_2 = \frac{\mathbf{u}_2^\perp}{\|\mathbf{u}_2^\perp\|}. \quad (2.1.13)$$

De volgende stappen gaan recursief verder door telkens \mathbf{u}_i te ontbinden in de projectie op $\text{span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_{i-1}\}$ en de orthogonale component:

$$\mathbf{u}_i = \left(\sum_{j=1}^{i-1} (\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{u}_i) \mathbf{v}_j \right) + \left(\mathbf{u}_i - \sum_{j=1}^{i-1} (\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{u}_i) \mathbf{v}_j \right) \equiv \mathbf{u}_i^\parallel + \mathbf{u}_i^\perp, \quad (2.1.14)$$

en de nieuwe basisvector te definiëren als:

$$\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{u}_i^\perp}{\|\mathbf{u}_i^\perp\|}. \quad (2.1.15)$$

Bemerk dat doordat de initiële vectoren \mathbf{u}_i lineair onafhankelijk zijn, de orthogonale component altijd verschillend van nul zal zijn, $\mathbf{u}_i^\perp \neq \mathbf{0}$.

Bemerk tot slot, zoals je al weet uit de Euclidische meetkunde, dat we voor een algemene vector \mathbf{x} die element is van de vectorruimte opgespannen door een orthonormale basis $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_k\}$ hebben dat:

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^k (\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{x}) \mathbf{v}_i. \quad (2.1.16)$$

Of nog: de componenten van \mathbf{x} t.o.v. een orthonormale basis lezen

$$x_i = \mathbf{v}_i \cdot \mathbf{x}. \quad (2.1.17)$$

Voorbeeld: je kan zelf uitwerken dat onder de Gram-Schmidt procedure:

$$\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \xrightarrow{\text{G.S.}} \left\{ \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \quad (2.1.18)$$

Voor de componenten van de vector $\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}$ t.o.v. deze specifieke G.S.-basis hebben we dan:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1, 1, 0) \cdot (1, 2, 3) = \frac{3}{\sqrt{2}} \\ x_2 &= \frac{1}{\sqrt{6}}(-1, 1, 2) \cdot (1, 2, 3) = \frac{7}{\sqrt{6}} \\ x_3 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(1, -1, 1) \cdot (1, 2, 3) = \frac{2}{\sqrt{3}}. \end{aligned} \quad (2.1.19)$$

Bemerk dat voor dit specifieke voorbeeld Gram-Schmidt in feite overbodig is voor het vinden van een orthonormale basis. We hebben immers 3 lineair onafhankelijke \mathbb{R}^3 vectoren, deze spannen noodzakelijkerwijs \mathbb{R}^3 volledig op. Een andere, meer voor de hand liggende orthonormale basis voor \mathbb{R}^3 is: $\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right\}$, die we ook nog zullen noteren als $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3\}$.

Uitbreiding naar functieruimtes. De noties van inproduct, norm en orthogonaliteit kunnen direct uitgebreid worden naar functieruimtes. Zo kunnen we als veralgemeening van (2.1.4) voor kwadratisch integreerbare (reële) functies op een interval $\Omega = (a, b)$ het L^2 inproduct definiëren als:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b dx f(x)g(x), \quad (2.1.20)$$

en de overeenkomstige norm als

$$\|f\| = (\langle f, f \rangle)^{1/2} = \left(\int_a^b dx f(x)f(x) \right)^{1/2}. \quad (2.1.21)$$

Ook kunnen dan (eventueel via een G.S. procedure) orthonormale basissen worden gedefinieerd:

$$\{f_1, f_2, \dots\} \quad \text{met} \quad \langle f_i, f_j \rangle = \int_a^b dx f_i(x)f_j(x) = \delta_{ij}. \quad (2.1.22)$$

We kunnen een algemene kwadratische integreerbare functie $g(x)$ dan expanderen (ontbinden) t.o.v. dergelijke orthonormale basis (veralgemeening van (2.1.16)) als:

$$g(x) = \sum_i \langle f_i, g \rangle f_i(x). \quad (2.1.23)$$

Zie het bord/werkcollege voor concrete illustraties hiervan.

2.2 Matrices

Een (reële) $(m \times n)$ -matrixtransformatie f_A beschrijft een lineaire transformatie van de vectorruimte \mathbb{R}^n naar de vectorruimte \mathbb{R}^m :

$$\mathbf{y} = f_A(\mathbf{x}), \quad (2.2.24)$$

met $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ en $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$. De voorwaarde van lineariteit betekent dat:

$$f_A(a\mathbf{x}_1 + b\mathbf{x}_2) = af_A(\mathbf{x}_1) + bf_A(\mathbf{x}_2). \quad (2.2.25)$$

We kunnen deze lineariteit gebruiken om de matrixtransformatie als volgt te parameteriseren. Een algemene vector $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ kunnen we schrijven als $\sum_{j=1}^n x_j \mathbf{e}_j$ met \mathbf{e}_j de basisvectoren $(0, 0, \dots, 1, 0, 0, \dots)$ ('1' op positie j). Door de lineariteit (2.2.25) hebben we dan:

$$\mathbf{y} = f_A(\mathbf{x}) = \sum_j x_j f_A(\mathbf{e}_j) = \sum_j x_j \mathbf{a}_j, \quad (2.2.26)$$

of uitgeschreven in componenten,

$$(y_1, y_2, \dots, y_m) = (\sum_j A_{1j} x_j, \sum_j A_{2j} x_j, \dots, \sum_j A_{mj} x_j), \quad (2.2.27)$$

waarbij we $\mathbf{a}_j = f_A(\mathbf{e}_j) = (A_{1j}, A_{2j}, \dots, A_{mj})$ stellen. Dit kunnen we nog schrijven als:

$$y_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} x_j, \quad (2.2.28)$$

of in compacte notatie:

$$\mathbf{y} = \mathbf{Ax}. \quad (2.2.29)$$

Een algemene matrixtransformatie wordt dus geparameteriseerd door $m \times n$ matrixcomponenten A_{ij} . Deze componenten hebben 2 indices, de eerste index noemen we de rij-index, de tweede index noemen we de kolom-index. Dit refereert naar de matrixvoorstelling als een tabel van **m rijen** en **n kolommen**:

$$\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \dots & A_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_j A_{1j} x_j \\ \sum_j A_{2j} x_j \\ \vdots \\ \sum_j A_{mj} x_j \end{bmatrix}, \quad (2.2.30)$$

of meer compact:

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \dots \ \mathbf{a}_n], \quad \mathbf{Ax} = \sum_{j=1}^n x_j \mathbf{a}_j. \quad (2.2.31)$$

met dan

$$\mathbf{a}_j = \begin{bmatrix} A_{1j} \\ A_{2j} \\ \vdots \\ A_{mj} \end{bmatrix}. \quad (2.2.32)$$

Voorbeeld. Als eenvoudig voorbeeld kan je uitwerken dat:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 3 \end{bmatrix} \quad (2.2.33)$$

De samenstelling van twee matrixtransformaties, eerst \mathbf{A} van \mathbb{R}^n naar \mathbb{R}^m , dan \mathbf{B} van \mathbb{R}^m naar \mathbb{R}^k , geeft een transformatie \mathbf{BA} van \mathbb{R}^n naar \mathbb{R}^k . De corresponderende $(k \times n)$ matrix \mathbf{BA} wordt gegeven door de **matrixvermenigvuldiging** van de $(k \times m)$ matrix \mathbf{B} met $(m \times n)$ matrix \mathbf{A} . Hierbij worden de componenten gevonden door de kolom-index van \mathbf{B} te *contraheren* met de rij-index van \mathbf{A} ⁴:

$$(\mathbf{BA})_{ij} = \sum_{l=1}^m B_{il} A_{lj}, \quad (2.2.34)$$

of in het kolom-beeld:

$$\mathbf{BA} = [\mathbf{Ba}_1 \ \mathbf{Ba}_2 \ \dots \ \mathbf{Ba}_n] \quad (2.2.35)$$

Bemerk dat we de transformatie van een vector, $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$, ook kunnen zien als een matrixvermenigvuldiging van een $(m \times n)$ matrix met een $(n \times 1)$ matrix (= kolomvector), wat dan een $(m \times 1)$ matrix (opnieuw een kolom-vector) geeft. Bemerk ook dat **de matrixvermenigvuldiging niet-commutatief is**, \mathbf{BA} is niet noodzakelijk gelijk (typisch niet) aan \mathbf{AB} . Indien dit wel het geval is, $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ spreken we van **commuterende matrices**.

Voorbeeld. Als eenvoudig voorbeeld geven we hier de matrixvermenigvuldiging van een (2×3) -matrix met een (3×2) matrix resulterend in een (2×2) matrix.

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 0 \\ 3 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 5 & 2 \end{bmatrix} \quad (2.2.36)$$

Dan is het ook nog nuttig van de **getransponeerde** van een $(m \times n)$ matrix te definiëren, als de nieuwe $(n \times m)$ matrix die je krijgt onder verwisseling van de rij-indices met de kolom-indices:

$$A_{ij}^T = A_{ji} \quad (2.2.37)$$

⁴Je kan deze uitdrukking makkelijk nagaan door voor een vector \mathbf{x} de opeenvolgende transformaties $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ en $\mathbf{z} = \mathbf{By}$ uit te schrijven en te identificeren met $\mathbf{z} = \mathbf{ABx}$

Je toont makkelijk aan dat

$$(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T \quad (2.2.38)$$

Verder kunnen we met de ' T -notatie' het inproduct (2.1.4) ook nog schrijven als de matrixvermenigvuldiging van een rij-vector ($(1 \times n)$ matrix) met een kolom-vector ($(n \times 1)$ -matrix)⁵:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^T \mathbf{v}, \quad (2.2.39)$$

wat inderdaad een (1×1) matrix, een getal dus, geeft. Even goed kan je de $(n \times n)$ -matrix $\mathbf{v}\mathbf{u}^T$ definiëren, met componenten $v_i u_j$.

Tot slot definiëren we **het spoor** (=Trace) van een vierkante $(n \times n)$ matrix als de som van de diagonalelementen:

$$Tr(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n A_{ii}, \quad (2.2.40)$$

waarvoor we makkelijk bewijzen dat:

$$Tr(\mathbf{AB}) = Tr(\mathbf{BA}) \quad Tr(\mathbf{A}^T) = Tr(\mathbf{A}). \quad (2.2.41)$$

2.2.1 Kolomruimte, rijruimte en nulruimtes

Een belangrijke toepassing van matrixrekening betreft het oplossen van een stelsel lineaire vergelijkingen

$$\begin{aligned} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \dots + A_{1n}x_n &= b_1 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \dots + A_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ A_{m1}x_1 + A_{m2}x_2 + \dots + A_{mn}x_n &= b_m, \end{aligned} \quad (2.2.42)$$

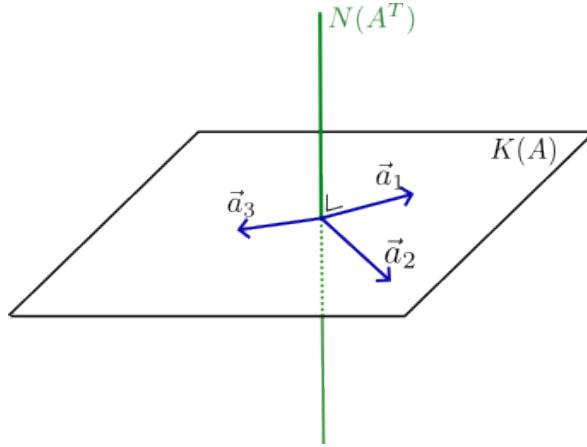
waarbij de n onbekenden x_i gezocht worden, gegeven de coëfficiënten A_{ij} en de brontermen b_i . In matrixvorm wordt dit: zoek de vector \mathbf{x} , gegeven de matrix \mathbf{A} en de vector \mathbf{b} , die voldoet aan:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}. \quad (2.2.43)$$

Het standaard algoritme om dergelijke matrixvergelijking exact op te lossen is Gauss-eliminatie, ook bestaan er heel krachtige numerieke methodes. We behandelen deze methodes hier niet, maar we stellen ons wel de vraag wanneer een lineair stelsel een al dan niet unieke oplossing heeft. Hiervoor introduceren we de begrippen kolomruimte, rijruimte en nulruimte.

⁵We zullen algemeen vectoren blijven voorstellen met ronde haakjes $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n)$. Wanneer we expliciet verwijzen naar de rol bij matrixoperaties, gebruiken we vierkante haakjes voor de kolom- en

rij-vectoren: $\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$ en $\mathbf{v}^T = [v_1 \ \dots \ v_n]$.



Figuur 2.3: Een 2D kolomruimte $K(A)$ opgespannen door 3 lineair afhankelijke kolomvectoren (blauw), samen met de corresponderende orthogonale 1D nulruimte $N(A^T)$ (groen).

Voor een algemene $(m \times n)$ matrix \mathbf{A} definiëren we de **kolomruimte** $K(A)$ als de vectorruimte opgespannen door de kolommen van \mathbf{A} :

$$K(A) = \text{span}\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n\}. \quad (2.2.44)$$

Dit zijn dus al de vectoren $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ die je kan krijgen door \mathbf{A} toe te passen op een bepaalde vector $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$: $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$. De **kolomrang** r van een matrix is dan de dimensie van deze kolomruimte, i.e. het aantal lineair onafhankelijke kolomvectoren van \mathbf{A} .

Indien $r < m$ dan is $K(A)$ een deelvectorruimte, $K(A) \subset \mathbb{R}^m$. Indien $r = m$ dan is $K(A) = \mathbb{R}^m$. In het eerste geval bestaat er dan een (niet-triviale) deelvectorruimte van vectoren \mathbf{y} die orthogonaal op elke vector van $K(A)$ staan. Voor deze vectoren \mathbf{y} geldt per definitie voor elke $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$:

$$0 = \mathbf{y} \cdot (\mathbf{Ax}) = \mathbf{y}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{x}^T \mathbf{A}^T \mathbf{y}, \quad (2.2.45)$$

wat equivalent is aan $\mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{0}$. We vinden dus dat de **nulruimte** $N(\mathbf{A}^T)$ van vectoren \mathbf{y} die door \mathbf{A}^T worden afgebeeld op de nulvector, $\mathbf{A}^T \mathbf{y} = \mathbf{0}$, orthogonaal staat op de kolomruimte $K(A)$. Men spreekt over de orthogonale complementen $K(A)$ en $N(\mathbf{A}^T)$:

$$\mathbb{R}^m = \text{span}\{K(A), N(\mathbf{A}^T)\} \quad \text{met} \quad K(A) \perp N(\mathbf{A}^T),$$

(2.2.46)

zie fig. 2.3 voor een illustratie.

Dit betekent dat elke vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ op een unieke manier kan worden ontbonden als:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_K + \mathbf{y}_0, \quad (2.2.47)$$

met $\mathbf{y}_K \in K(A)$, $\mathbf{y}_0 \in N(\mathbf{A}^T)$ en $\mathbf{y}_K \cdot \mathbf{y}_0 = 0$.

Volledig analoog kunnen we ook de **rijruimte** $K(\mathbf{A}^T)$ definiëren als de vectorruimte in \mathbb{R}^n opgespannen door de rijvectoren van \mathbf{A} . Dit zijn al de vectoren \mathbf{x} die je kan

krijgen door toepassing van \mathbf{A}^T : $\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}$. De **rijrang** r is dan de dimensie van deze rijruimte, i.e. het aantal lineair onafhankelijke rijvectoren van \mathbf{A} . Op zijn beurt bestaat de nulruimte $N(A) \subset \mathbb{R}^n$ dan uit al de vectoren $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, die door \mathbf{A} worden afgebeeld op de nulvector: $\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$. En beide deelvectorruimtes vormen dan opnieuw orthogonale complementen, ditmaal van \mathbb{R}^n :

$$\mathbb{R}^n = \text{span}\{K(A^T), N(A)\} \quad \text{met} \quad K(A^T) \perp N(A). \quad (2.2.48)$$

Een fundamentele stelling van lineaire algebra (die we hier niet explicet bewijzen) is de **rangstelling**: *voor een algemene matrix is de kolomrang gelijk aan de rijrang*. Vandaar dat we in vorige paragrafen hetzelfde symbool r gebruikten, en vanaf nu spreken we dan ook over de **rang** r van een matrix. Uit het voorgaande hebben we dan ook onmiddellijk voor de dimensies van de nulruimtes: $\dim(N(A)) = n - r$ en $\dim(N(A^T)) = m - r$. Samenvattend:

$$\dim(K(A)) = \dim(K(A^T)) = r \quad \dim(N(A)) = n - r \quad \dim(N(A^T)) = m - r. \quad (2.2.49)$$

Keren we terug naar de vraag van het begin van deze subsectie: wanneer heeft het lineaire stelsel $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (een) oplossing(en)? Dan is het nu duidelijk dat $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ enkel oplossingen heeft als \mathbf{b} in de kolomruimte van \mathbf{A} ligt. Wanneer $r = m$ is dat altijd zo, want dan hebben we dat $K(A) = \mathbb{R}^m$. Verder als inderdaad $\mathbf{b} \in K(A)$ dan hebben we voor $r = n$ één welbepaalde oplossing \mathbf{x} (toon dit zelf aan uit $N(A) = \mathbf{0}$). Voor $r < n$ zijn er dan oneindig veel oplossingen:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}_p + \mathbf{x}_0, \quad (2.2.50)$$

met \mathbf{x}_p een bepaalde particuliere oplossing van $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ en \mathbf{x}_0 elke vector in $N(A)$.

Terzijde, al vooruitlopend op hoofdstuk 5: daar zullen we zien dat voor lineaire differentiaalvergelijkingen voor $y(x)$ van de schematische vorm $L(D)y(x) = f(x)$, we overeenkomstig hebben dat de algemene oplossing kan geschreven worden als $y(x) = y_p(x) + y_0(x)$, met $y_p(x)$ een bepaalde particuliere oplossing $L(D)y_p(x) = f(x)$, en $y_0(x)$ een algemene homogene oplossing $L(D)y_0(x) = 0$, ofwel in de taal van lineaire algebra: een algemene vector in de nulruimte van $L(D)$.

Voor de bepaling van de nulruimte en kolomruimte van een algemene matrix A kan je de \textcircled{C} Maple-commando's Nullspace en Columnspace gebruiken. Tot slot geven we hier ter illustratie een eenvoudig voorbeeld waaruit je de verschillende subruimtes eenvoudig zelf kan aflezen:

Voorbeeld: Beschouw de matrix

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (2.2.51)$$

dan vind je makkelijk dat:

$$\begin{aligned}
 K(A) &= \text{span}\left\{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right\} = \mathbb{R}^2, \\
 N(A^T) &= \mathbf{0} \\
 K(A^T) &= \text{span}\left\{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right\}, \\
 N(A) &= \text{span}\left\{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}\right\}
 \end{aligned} \tag{2.2.52}$$

Het stelsel $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ heeft dus altijd oneindig veel oplossingen ($r = m = 2 < n$). Expliciet vinden we de oplossingen als (vergelijk met (2.2.50)):

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \frac{b_1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + \frac{b_2}{2} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + c \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix} + d \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix}, \tag{2.2.53}$$

voor algemene $c, d \in \mathbb{R}$.

2.2.2 Matrix inverse

Wanneer $m = n = r$ heeft het lineair stelsel $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ een unieke oplossing \mathbf{x} voor elke \mathbf{y} , en vormt \mathbf{A} dus een bijectieve afbeelding. In dat geval kunnen we de inverse matrix \mathbf{A}^{-1} definiëren, waarvoor:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{y}. \tag{2.2.54}$$

Deze matrixinverse is dus gedefinieerd voor **vierkante matrices** ($m = n$) die **volle rang** hebben ($n = r$). Een expliciete uitdrukking voor deze inverse kan worden via de Gauss-Jordan eliminatie. We geven deze methode hier niet. Om via \textcircled{C} Maple een matrixinverse te bepalen, kan je het commando `MatrixInverse` gebruiken.

Vermenigvuldigen we nu vergelijking (2.2.54) aan de linkerkant met \mathbf{A} , dan krijgen we $\mathbf{Ax} = \mathbf{AA}^{-1}\mathbf{y}$ of dus ook: $\mathbf{y} = \mathbf{AA}^{-1}\mathbf{y}$. Aangezien dit voor elke \mathbf{y} moet gelden vinden we dat $\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}_{(n \times n)}$, met $\mathbf{I}_{(n \times n)}$ de $(n \times n)$ **eenheidsmatrix**:

$$\mathbf{I}_{(n \times n)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \tag{2.2.55}$$

Verder kunnen we volledig analoog door de vergelijking $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$ aan de linkerkant met \mathbf{A}^{-1} te vermenigvuldigen besluiten dat $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}_{(n \times n)}$.

Voor een vierkante $(n \times n)$ -matrix van volle rang hebben we dus volgende eigenschappen voor de matrixinverse:

$$\boxed{\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}_{(n \times n)}}. \quad (2.2.56)$$

Als korte **oefening** kan je nu zelf aantonen dat:

$$(\mathbf{BA})^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}^{-1}, \quad (2.2.57)$$

voor de inverse van de vermenigvuldigde matrices \mathbf{BA} (let op de volgorde!).

2.2.3 Projectie en kleinste kwadraten benadering

Stel, we hebben een stel $r < m$ lineaire onafhankelijke vectoren $\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^m$ ($i = 1, \dots, r$) en we willen voor een algemene vector \mathbf{y} de component \mathbf{y}^\parallel parallel aan de subruimte V opgespannen door deze vectoren bepalen. I.e. we willen \mathbf{y} ontbinden als:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}^\parallel + \mathbf{y}^\perp, \quad (2.2.58)$$

met $\mathbf{y}^\perp \cdot \mathbf{a}_i = 0$ en dus $\mathbf{y} \cdot \mathbf{a}_i = \mathbf{y}^\parallel \cdot \mathbf{a}_i$ voor alle $i = 1, \dots, r$. Dit deden we reeds expliciet bij de Gramm-Schmidt procedure (2.1.14) voor het geval van orthonormale vectoren \mathbf{a}_i , nu beschouwen we algemene vectoren \mathbf{a}_i die weliswaar lineair onafhankelijk zijn, maar niet noodzakelijk orthogonaal.

Uit de vorige subsectie kunnen we dit probleem nu herformuleren als: ontbind \mathbf{y} als:

$$\mathbf{y} = \mathbf{y}_K + \mathbf{y}_0, \quad (2.2.59)$$

met \mathbf{y}_K in de kolomruimte van de $(m \times r)$ matrix $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \dots \mathbf{a}_r]$ en \mathbf{y}_0 in de nulruimte $N(A^T)$. Welnu, we kunnen aantonen dat

$$\mathbf{y}_K = \mathbf{Py} \quad \text{met} \quad \mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T. \quad (2.2.60)$$

\mathbf{P} noemen we de **projector** op de subruimte $K(A)$.

Bewijs: $\mathbf{Py}_0 = \mathbf{0}$ omdat $\mathbf{A}^T\mathbf{y}_0 = \mathbf{0}$. Verder is $\mathbf{y}_K = \mathbf{Ax}$ voor een bepaalde \mathbf{x} , waaruit:

$$\mathbf{Py}_K = \mathbf{PAx} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{Ax} = \mathbf{y}_K, \quad (2.2.61)$$

zodat inderdaad $\mathbf{Py} = \mathbf{y}_K$.⁶

Wat de ontbinding (2.2.58) betreft kunnen we dus schrijven:

$$\boxed{\mathbf{y} = \mathbf{y}^\parallel + \mathbf{y}^\perp = \mathbf{Py} + (\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{y}}. \quad (2.2.62)$$

⁶Bemerkt dat de vierkante $(r \times r)$ matrix $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T\mathbf{A}$ inderdaad inverteerbaar is, zodat vergelijking (2.2.60) zin heeft. Om dit aan te tonen, bewijzen we dat de nulruimte van \mathbf{B} triviaal is, $N(B) = \mathbf{0}$. Aangezien \mathbf{A} volle rang r heeft, hebben we dat $\mathbf{x}^T\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = (\mathbf{Ax})^T\mathbf{Ax} = 0$ impliceert dat $\mathbf{x} = \mathbf{0}$. Er bestaat dus geen $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ waarvoor $\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{0}$ zodat we effectief hebben dat $N(B = A^T A) = \mathbf{0}$.

Bemerkt ook dat voor de projector geldt dat $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$, én dat deze symmetrisch is, i.e. $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$. Algemeen zal elke matrix die aan deze twee voorwaarden voldoet, een projector zijn op een bepaalde deelvectorruimte. Bemerkt tot slot dat $\mathbf{I} - \mathbf{P}$ zelf ook een projector is, het is de projector op het orthogonale complement:

$$(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{y} = \mathbf{y}^\perp. \quad (2.2.63)$$

Voorbeeld: Bepaal de (3×3) projector \mathbf{P} voor $\{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\} = \left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ c \end{bmatrix} \right\}$, met $c \in \mathbb{R}$.

We hebben

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & c \end{bmatrix}. \quad (2.2.64)$$

Wanneer we dit in (2.2.60) pluggen vinden we (bvb. met behulp van $\textcircled{C}\text{Maple}$):

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1+c^2} & \frac{c}{1+c^2} \\ 0 & \frac{c}{1+c^2} & \frac{c^2}{1+c^2} \end{bmatrix}, \quad (2.2.65)$$

Bemerkt dat we voor $c = 0$ het logische resultaat terugvinden dat \mathbf{P} de projector is op het (x, y) -vlak:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.2.66)$$

Voorbeeld: Toon aan dat we voor $\mathbf{a}_i = \mathbf{v}_i$, met nu \mathbf{v}_i orthonormale vectoren, we de uitdrukking (2.1.14) terugvinden voor de projector \mathbf{P} waarvoor $\mathbf{P}\mathbf{u} = \mathbf{u}^\parallel$.

We hebben $\mathbf{A} = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_r]$ en dus $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})_{ij} = \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$, of nog: $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{I}$. Zodoende:

$$\mathbf{P} = \mathbf{A} \mathbf{A}^T = \sum_{i=1}^r \mathbf{v}_i \mathbf{v}_i^T, \quad (2.2.67)$$

wat precies overeenkomt met de eerste term ($= \mathbf{P}\mathbf{u}$) in (2.1.14).

Kleinste kwadraten. Veel computationele problemen en modelleringsproblemen vertalen zich naar het vinden van de **kleinste kwadraten benadering** voor het lineair stelsel $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$, gegeven een vector $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, een $(m \times r)$ matrix \mathbf{A} van volle (rij-)rang r en met $m > r$. Algemeen zal \mathbf{y} niet in de kolomruimte $K(A)$ liggen, waardoor deze vergelijking geen exacte oplossing heeft. De kleinste kwadraat benadering is dan de vector $\tilde{\mathbf{y}} \in K(A)$ waarvoor de norm $\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\|$ minimaal is. (Of equivalent, $\sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2$ minimaal is, vandaar 'kleinste kwadraat' benadering).

De gezochte $\tilde{\mathbf{y}}$ is niets anders dan de projectie van \mathbf{y} op de kolomruimte. Inderdaad, uit de ontbinding (2.2.58) vinden we onmiddellijk $\|\mathbf{y} - \tilde{\mathbf{y}}\|^2 = \|\mathbf{y}^\perp\|^2 + \|\mathbf{y}^\parallel - \tilde{\mathbf{y}}\|^2$ wat duidelijk minimaal wordt voor

$$\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{y}^\parallel = \mathbf{P}\mathbf{y}. \quad (2.2.68)$$

Uit de uitdrukking voor \mathbf{P} en uit $\tilde{\mathbf{y}} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ vinden we verder voor de correspondende \mathbf{x} :

$$\boxed{\mathbf{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{y}}. \quad (2.2.69)$$

Bemerk dat deze \mathbf{x} ook kan worden bekomen als de unieke oplossing van:

$$\boxed{\mathbf{A}^T \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^T \mathbf{y}}. \quad (2.2.70)$$

Tot slot wordt de gemiddelde kwadratische fout bij de kleinste kwadraten benadering (*mean squared error=MSE*) nog gedefinieerd als:

$$MSE = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m (y_i - \tilde{y}_i)^2 = \frac{1}{m} \|\mathbf{y}^\perp\|^2 = \frac{1}{m} \|(\mathbf{I} - \mathbf{P})\mathbf{y}\|^2. \quad (2.2.71)$$

Toepassing: kleinste kwadraten fit. We hebben m datapunten:

$(t_1, y(t_1)), (t_2, y(t_2)), \dots, (t_m, y(t_m))$, die we willen fitten als een lineaire combinatie van r functies: $\tilde{y}(t) = x_1 f_1(t) + x_2 f_2(t) + \dots + x_r f_r(t)$ (met $r < m$). Bij de kleinste kwadraten fit worden de fit-parameters (x_1, \dots, x_r) zodanig bepaald dat de kwadratische fout $\sum_{i=1}^m (\tilde{y}(t_i) - y(t_i))^2$ minimaal is. Vertalen we dit naar lineaire algebra dan zien we dat:

$$\tilde{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \tilde{y}(t_1) \\ \vdots \\ \tilde{y}(t_m) \end{bmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{x}, \quad (2.2.72)$$

met

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} f_1(t_1) & f_2(t_1) & \dots & f_r(t_1) \\ f_1(t_2) & f_2(t_2) & \dots & f_r(t_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ f_1(t_m) & f_2(t_m) & \dots & f_r(t_m) \end{bmatrix}. \quad (2.2.73)$$

Waarbij we de kwadratische fit-parameters dan vinden als (zie uitdrukking (2.2.69)):

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_r \end{bmatrix} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{y}, \quad (2.2.74)$$

met \mathbf{y} de vector van originele gemeten y -waarden: $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y(t_1) \\ \vdots \\ y(t_m) \end{bmatrix}$.

Voorbeeld. Bepaal als voorbeeld de kleinste kwadraaten lineaire fit $\tilde{y}(t) = x_1 + x_2 t$ (met dus $f_1(t) = 1, f_2(t) = t$), voor de data $\mathbf{y} = (1, 3, 8)$ genomen op tijdstippen $(0, 1, 3)$.

We vinden onmiddellijk dat:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad (2.2.75)$$

en uit (2.2.69) dan (bvb. via \textcircled{C} Maple):

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \frac{1}{14} \begin{bmatrix} 10 & -4 \\ -4 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 12 \\ 27 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{6}{7} \\ \frac{33}{14} \end{bmatrix} \quad (2.2.76)$$

2.3 Vierkante matrices

2.3.1 Determinant

De determinant van een vierkante reële ($n \times n$) matrix \mathbf{A} , genoteerd als (bvb. voor $n = 3$):

$$\det(A) = |\mathbf{A}| = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix}, \quad (2.3.77)$$

is een belangrijk getal, $\det(A) \in \mathbb{R}$, dat we kunnen associëren aan een matrix. We kunnen $\det(A)$ recursief definiëren, vertrekende van de definitie voor $n = 2$:

$$\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix} = A_{11}A_{22} - A_{12}A_{21}. \quad (2.3.78)$$

We definiëren nu de **minor** M_{ij} van een ($n \times n$) matrix \mathbf{A} als de determinant van de $((n-1) \times (n-1))$ matrix waarvan we de i -de rij en j -de kolom schrappen, met dus bijvoorbeeld voor de (3×3) matrix:

$$M_{12} = \begin{vmatrix} A_{21} & A_{23} \\ A_{31} & A_{33} \end{vmatrix}. \quad (2.3.79)$$

Met de definitie voor de bijhorende **cofactor** $C_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$, hebben we dan voor de determinant van A :

$$\det(A) = \sum_{j=1}^n A_{jk} C_{jk} = \sum_{j=1}^n A_{kj} C_{kj}, \quad (2.3.80)$$

waarbij een willekeurige vaste $k = 1, \dots, n$ in de som hier telkens hetzelfde resultaat geeft (!). We spreken van de ontwikkeling van de determinant naar de k -de kolom (eerste uitdrukking), of k -de rij (tweede uitdrukking).

Voorbeeld. Als voorbeeld werken we voor de algemene (3×3) matrix (2.3.77) de ontwikkeling van $\det(A)$ naar de eerste rij uit:

$$\begin{aligned}\det(A) &= A_{11}C_{11} + A_{12}C_{12} + A_{13}C_{13} \\ &= A_{11}(A_{22}A_{33} - A_{23}A_{32}) - A_{12}(A_{21}A_{33} - A_{23}A_{31}) + A_{13}(A_{21}A_{32} - A_{22}A_{31}) \\ &= A_{11}A_{22}A_{33} - A_{11}A_{23}A_{32} - A_{12}A_{21}A_{33} \\ &\quad + A_{12}A_{23}A_{31} + A_{13}A_{21}A_{32} - A_{13}A_{22}A_{31}.\end{aligned}\tag{2.3.81}$$

Voor het vervolg van de cursus (in het bijzonder voor hoofdstuk 4) is het handig van relatief snel dergelijke determinant van een (3×3) matrix uit te kunnen werken. Je kan tot slot hier nu ook nog explicet nagaan dat bijvoorbeeld de vergelijking (ontwikkeling naar tweede kolom):

$$\det(A) = A_{12}C_{12} + A_{22}C_{22} + A_{32}C_{32},\tag{2.3.82}$$

inderdaad hetzelfde resultaat geeft.

Men kan de inductieve formule(s) (2.3.80) verder uitwerken tot een 'monster-vergelijking' voor de determinant rechtstreeks in functie van de matrixelementen:

$$\begin{aligned}\epsilon_{i_1, i_2, \dots, i_n} \det(A) &= \sum_{(j_1, j_2, \dots, j_n)} \epsilon_{j_1, j_2, \dots, j_n} A_{i_1 j_1} A_{i_2 j_2} \dots A_{i_n j_n} \\ &= \sum_{(j_1, j_2, \dots, j_n)} \epsilon_{j_1, j_2, \dots, j_n} A_{j_1 i_1} A_{j_2 i_2} \dots A_{j_n i_n}\end{aligned}\tag{2.3.83}$$

hierbij gaat de som over de n j -indices van 1 tot n , en introduceerden we het Levi-Civita symbool, gedefinieerd door:

$$\begin{aligned}\epsilon_{1, 2, \dots, n} &= 1 \quad \text{en} \\ \epsilon_{i_1, \dots, i_k, \dots, i_l, \dots, i_n} &= -\epsilon_{i_1, \dots, i_l, \dots, i_k, \dots, i_n} \quad (\text{een minteken bij elke permutatie van 2-indices})\end{aligned}\tag{2.3.84}$$

Uit de tweede voorwaarde zien we onmiddellijk dat het Levi-Civita symbool verdwijnt wanneer twee indices gelijk zijn. Voor verschillende indices (i_1, \dots, i_n) krijgen we dat het LC-symbool gelijk is aan ± 1 , naargelang het aantal paarsgewijze permutaties nodig om van $(1, \dots, n)$ naar (i_1, \dots, i_n) te gaan.

Zo kan je zelf nagaan voor het 3D Levi-Civita symbool:

$$\begin{aligned}\epsilon_{123} &= 1 & \epsilon_{132} &= -1 & \epsilon_{213} &= -1 \\ \epsilon_{231} &= 1 & \epsilon_{312} &= 1 & \epsilon_{321} &= -1.\end{aligned}\tag{2.3.85}$$

Uitdrukking (2.3.83) toont explicet dat de determinant de som is van $n!$ verschillende termen, waarbij elke term het product is van n matrixelementen, waarbij elk mogelijke rij-index i en elk mogelijke kolom-index j juist één keer voorkomt. Het teken voor de term in kwestie wordt dan precies bepaald door het aantal paarsgewijze

permutaties die nodig zijn om (j_1, \dots, j_n) te permuteren tot (i_1, \dots, i_n) . Zie ook het voorbeeld van de 3×3 matrix (2.3.81).

Voorbeeld. Als meest eenvoudige voorbeeld werken we (2.3.83) uit voor $n = 2$. Kiezen we $(i_1, i_2) = (1, 2)$ dan vinden we:

$$\epsilon_{12} \det(A) = \epsilon_{12} A_{11} A_{22} + \epsilon_{21} A_{21} A_{12}, \quad (2.3.86)$$

of aangezien: $\epsilon_{12} = 1$ en $\epsilon_{21} = -1$,

$$\det(A) = A_{11} A_{22} - A_{21} A_{12}, \quad (2.3.87)$$

wat dus inderdaad de correcte vergelijking geeft.

Bemerkt dat vergelijkingen (2.3.80) en 2.3.83 voor de determinant nuttig zijn om alerhande eigenschappen van de determinant te bewijzen, vanuit computationeel standpunt is het echter een nachtmerrie. Een rechtstreekse berekening van de determinant op basis van (2.3.83) vergt immers de sommatie van $n!$ verschillende termen. Voor grote n , zal dit aantal termen sterker dan exponentieel $\sim e^n$ toenemen, wat al gauw buiten het bereik van een computer ligt. Gelukkig kan men aantonen dat de determinant ook kan verkregen worden als het product van de diagonalelementen die overblijven na Gauss-eliminatie. Dergelijke berekening schaalt slechts polynomiaal $\sim n^3$, en het is dan ook via die procedure dat Maple de determinant berekent.

Laat ons nu nog een aantal **eigenschappen van de determinant** overlopen die je kan afleiden uit (2.3.80) en/of (2.3.83):

- **Determinant van getransponeerde:**

$$\det(A) = \det(A^T) \quad (2.3.88)$$

- **Verwisseling rijen/kolommen:** Verwisselen we in \mathbf{A} twee rijen (of twee kolommen) met elkaar, dan geldt voor de determinant van de nieuwe matrix $\tilde{\mathbf{A}}$:

$$\det(\tilde{\mathbf{A}}) = -\det(\mathbf{A}). \quad (2.3.89)$$

- **Vermenigvuldiging met een getal:** Voor de determinant van $\lambda \mathbf{A}$, met λ een getal, hebben we dat:

$$\det(\lambda \mathbf{A}) = \lambda^n \det(\mathbf{A}). \quad (2.3.90)$$

Verder, als we in A enkel de elementen van 1 rij (of 1 kolom) met λ vermenigvuldigen, hebben we voor de determinant van de nieuwe matrix $\tilde{\mathbf{A}}$:

$$\det(\tilde{\mathbf{A}}) = \lambda \det(\mathbf{A}). \quad (2.3.91)$$

- **Diagnose volle rang:** $\det(A) \neq 0$ a.s.a. de matrix volle rang $r = n$ heeft, i.e. de n kolom-vectoren in \mathbf{A} , alsook de n rij-vectoren van \mathbf{A} lineair onafhankelijk zijn.

- Determinant van matrixproduct:

$$\det(AB) = \det(A)\det(B) \quad (2.3.92)$$

Hierdoor hebben we ook onmiddellijk dat:

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}, \quad (2.3.93)$$

aangezien $\det(\mathbf{I}) = 1$.

- **Expliciete vergelijking matrix-inverse:** Voor de matrixcomponenten A_{ij}^{-1} ($\neq 1/A_{ij}$ (!)) van de matrixinverse \mathbf{A}^{-1} hebben we de expliciete formule

$$A_{ij}^{-1} = \frac{C_{ji}}{\det(A)} \quad (2.3.94)$$

Explicit (ga zelf na) hebben we dan bijvoorbeeld volgende uitdrukking voor de inverse van een algemene (2×2) matrix:

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \quad A^{-1} = \frac{1}{ad - bc} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}. \quad (2.3.95)$$

Tot slot bespreken we nog de interpretatie van de determinant als het volume. Fig. 2.4 toont het volume van een parallellogram en parallellepipedum bepaald door twee (drie) vectoren. Voor algemene dimensie veralgemeend dit tot het volume van een polytoop bepaald door n vectoren $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n\}$. Algemeen zullen we hebben dat **het volume van deze polytoop gelijk is aan de absolute waarde van de determinant** van de matrix opgebouwd uit de kolom- (of rij-) vectoren:

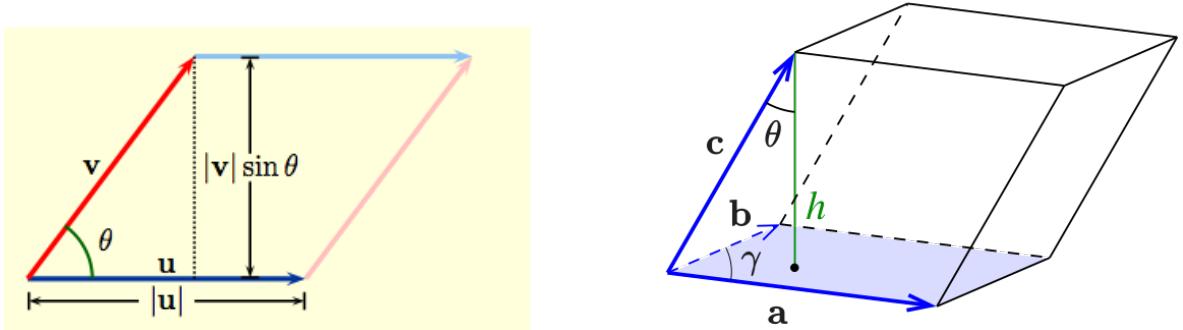
$$V = |\det([\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_n])|, \quad (2.3.96)$$

waarbij het teken (\pm) van de determinant overeenkomt met de rechts- of linkshandige orientatie van de vectoren, zie de rechterhandregel (https://en.wikipedia.org/wiki/Right-hand_rule).

We bewijzen kort deze uitdrukking. Zonder verlies van algemeenheid kiezen we \mathbf{v}_1 in de \mathbf{e}_1 richting: $\mathbf{v}_1 = (v_1, 0, 0, \dots)$. De tweede vector ontbinden we dan in de parallelle en orthogonale component ten opzichte van de eerste: $\mathbf{v}_2 = \mathbf{v}_2^{\parallel} + \mathbf{v}_2^{\perp}$ waarbij we de orthogonale component (opnieuw zonder verlies van algemeenheid) in de \mathbf{e}_2 richting kiezen: $\mathbf{v}_2 = (v_{21}, v_{22}, 0, 0, \dots)$, met $v_{22} = v_2^{\perp}$ de orthogonale component $\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{e}_2$. Zo verder gaand schrijven we: $\mathbf{v}_i = (v_{i1}, \dots, v_{ii-1}, v_i^{\perp}, 0 \dots)$. De determinant leest dan:

$$\det([\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_n]) = \begin{vmatrix} v_1 & v_{21} & v_{31} & \dots & v_{n1} \\ 0 & v_2^{\perp} & v_{32} & \dots & v_{n2} \\ 0 & 0 & v_3^{\perp} & \dots & v_{n3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & v_n^{\perp} \end{vmatrix} = v_1 v_2^{\perp} v_3^{\perp} \dots v_n^{\perp} = \pm |v_1 v_2^{\perp} v_3^{\perp} \dots v_n^{\perp}|, \quad (2.3.97)$$

wat inderdaad op het \pm teken na overeenkomt met het volume \square .



Figuur 2.4: (a): Parallellogram bepaald door \mathbf{u} en \mathbf{v} , met als oppervlak $V = \det([\mathbf{u} \ \mathbf{v}]) = \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\| \sin \theta$ ($\theta > 0$ voor de georiënteerde hoek tussen \mathbf{u} en \mathbf{v}); (b): Parallellepipedum bepaald door \mathbf{a}, \mathbf{b} en \mathbf{c} , met als volume $V = \det([\mathbf{a} \ \mathbf{b} \ \mathbf{c}]) = \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\| \|\mathbf{c}\| \sin \gamma \cos \theta$ (orientatie van de drie vectoren is positief volgens de rechterhandregel)

2.3.2 Basistransformaties

Een nuttige concept in lineaire algebra is dat van basistransformaties, waarbij wordt overgegaan van één basis $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_n\}$ naar een andere basis $\{\mathbf{v}'_1, \dots, \mathbf{v}'_n\}$. Dergelijke basistransformatie wordt geparameteriseerd door een inverteerbare matrix \mathbf{M} :

$$\mathbf{v}'_i = \sum_j M_{ji} \mathbf{v}_j, \quad (2.3.98)$$

waarbij de kolomvectoren van de matrix \mathbf{M} dus de componenten zijn van de nieuwe vectoren t.o.v. de oude basis. Een bepaalde vector uitgedrukt t.o.v. deze twee verschillende basissen zal verschillende componenten hebben (zie ook fig. 2.5):

$$\sum_j x_j \mathbf{v}_j = \sum_i x'_i \mathbf{v}'_i = \sum_i \sum_j x'_i M_{ji} \mathbf{v}_j, \quad (2.3.99)$$

waaruit:

$$x_j = \sum_i M_{ji} x'_i \Rightarrow x'_i = \sum_j M_{ij}^{-1} x_j, \quad (2.3.100)$$

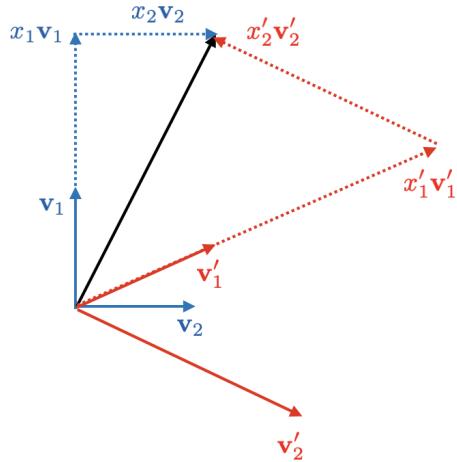
of compact geschreven:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{x}. \quad (2.3.101)$$

Voor de basistransformatie (2.3.98) geeft dit ons dus de overeenkomstige transformatie van de vectorcomponenten.

Hebben we nu verder een matrixtransformatie $\mathbf{y} = \mathbf{Ax}$ in de originele basis dan vinden we de corresponderende transformatie van \mathbf{A}' in de nieuwe basis uit: $\mathbf{y}' = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{y} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{Ax} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{AMx}'$ ofwel:

$$\mathbf{y}' = \mathbf{A}' \mathbf{x}' \quad \text{met} \quad \mathbf{A}' = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{AM}. \quad (2.3.102)$$



Figuur 2.5: Een basistransformatie: dezelfde vector (zwart) heeft componenten (x_1, x_2) t.o.v. de basis $\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\}$ en componenten (x'_1, x'_2) t.o.v. de basis $\{\mathbf{v}'_1, \mathbf{v}'_2\}$.

Voorbeeld: geroteerde basis. Beschouw de basis $\mathbf{v}_1 = \mathbf{e}_x = (1, 0)$, $\mathbf{v}_2 = \mathbf{e}_y = (0, 1)$ en de geroteerde basis $\mathbf{v}'_1 = \mathbf{e}'_x = (\cos \theta, \sin \theta)$, $\mathbf{v}'_2 = \mathbf{e}'_y = (-\sin \theta, \cos \theta)$. Wat is de transformatie, die voor een vector de componenten $\mathbf{x}' = (x', y')$ t.o.v. de geroteerde basis geeft, in functie van de originele componenten $\mathbf{x} = (x, y)$.

Oplossing: We hebben onmiddellijk (met $c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$)

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}, \quad (2.3.103)$$

waaruit we de inverse vinden als (bvb. via $\text{Maple MatrixInverse}$)⁷:

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}, \quad (2.3.104)$$

zodoende:

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} cx + sy \\ -sx + cy \end{bmatrix}. \quad (2.3.105)$$

2.3.3 Eigenvectoren, eigenwaarden, diagonalisatie en de Jordan-decompositie

\mathbf{v}_i is een **eigenvector** van de vierkante matrix \mathbf{A} , wanneer

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i, \quad (2.3.106)$$

⁷Het blijkt hier over een rotatiematrix te gaan (zie verderop § 2.4.1), zodat $\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^T$.

voor een getal λ_i dat we **de eigenwaarde** horende bij \mathbf{v}_i noemen. Al de eigenwaarden van een matrix worden gevonden uit de *karakteristieke polynoom*:

$$p_A(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0, \quad (2.3.107)$$

inderdaad deze voorwaarde drukt precies uit dat $N(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) \neq \mathbf{0}$ niet-triviaal is, of dat er met andere woorden een \mathbf{v} bestaat waarvoor (2.3.106) geldt. Deze karakteristieke polynoom is van n -de graad, en heeft wegens de hoofdstelling van de algebra (1.4.56), n al dan niet verschillende wortels $\lambda_i \in \mathbb{C}$ met *algebraïsche multipliciteit* m_i :

$$\begin{aligned} p_A(\lambda) &= \lambda^n + p_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + p_0 \\ &= (\lambda - \lambda_1)^{m_1}(\lambda - \lambda_2)^{m_2} \dots, \end{aligned} \quad (2.3.108)$$

met $\sum_i m_i = n$.

Bemerkt dat, indien voor een reële matrix λ_i complex is, dan is de bijhorende \mathbf{v}_i automatisch ook complex (zie 2.3.106), en dan bestaat er een andere complex toegevoegde eigenwaarde $\bar{\lambda}_i$ met eigenvector $\bar{\mathbf{v}}_i$, inderdaad:

$$\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{v}}_i = \mathbf{A}\bar{\mathbf{v}}_i = \bar{\lambda}_i\bar{\mathbf{v}}_i. \quad (2.3.109)$$

De *geometrische multipliciteit* \tilde{m}_i horende bij een eigenwaarde λ_i is de dimensie van de vectorruimte opgespannen door al de eigenvectoren met deze eigenwaarde (i.e. de **eigenruimte**). We hebben in ieder geval dat $1 \leq \tilde{m}_i$, men kan verder ook bewijzen dat $\tilde{m}_i \leq m_i$: de dimensie van de eigenruimte is kleiner of gelijk aan de algebraïsche multipliciteit van de corresponderende eigenwaarde. Indien de geometrische multipliciteiten voor alle eigenwaarden gelijk zijn aan de algebraïsche multipliciteiten, dan hebben we dat $\sum_i \tilde{m}_i = n$, de eigenvectoren spannen de gehele vectorruimte \mathbb{R}^n op. Dergelijke matrices noemen we **diagonaliseerbaar**. Nemen we n lineair onafhankelijke eigenvectoren \mathbf{v}_i samen in de matrix

$$\mathbf{M} = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_n], \quad (2.3.110)$$

dan zien we dat

$$\mathbf{AM} = \mathbf{MD}, \quad (2.3.111)$$

met \mathbf{D} de diagonalmatrix met de eigenwaarden op de diagonaal:

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n \end{bmatrix}. \quad (2.3.112)$$

Dit kunnen we ook nog herschrijven als:

$$\mathbf{A} = \mathbf{MDM}^{-1}. \quad (2.3.113)$$

Rechter versus linkereigenvectoren. Per constructie zijn de kolomvectoren van \mathbf{M} hier de eigenvectoren van \mathbf{A} : $\mathbf{Av}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i$. Men spreekt soms ook nog over de

rechtereigenvectoren. Dit er onderscheid van wat we de *linkereigenvectoren* van \mathbf{A} noemen:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{L}i}^T \mathbf{A} = \lambda_i \mathbf{v}_{\mathbf{L}i}^T \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}^T \mathbf{v}_{\mathbf{L}i} = \lambda_i \mathbf{v}_{\mathbf{L}i}. \quad (2.3.114)$$

Toon zelf aan dat de rijvectoren van \mathbf{M}^{-1} precies deze linkereigenvectoren zijn, zodat dus:

$$\mathbf{M}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{v}_{\mathbf{L}1}^T \\ \mathbf{v}_{\mathbf{L}2}^T \\ \vdots \\ \mathbf{v}_{\mathbf{L}n}^T \end{bmatrix}. \quad (2.3.115)$$

Jordan-vorm. Indien voor sommige eigenwaarden λ_i de dimensie van de eigenruimte kleiner is dan de algebraïsche multiplicitet kan de de matrix niet gediagonaliseerd worden. We kunnen wel altijd de matrix in zijn *Jordan-vorm* brengen:

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^{-1}, \quad (2.3.116)$$

met nu de matrix \mathbf{J} van de blokvorm (met dus nullen waar er geen Jordan-blokken \mathbf{J}_k zijn):

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_{n_1}(\lambda_1) & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{J}_{n_2}(\lambda_2) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & & \mathbf{J}_{n_l}(\lambda_l) \end{bmatrix}, \quad (2.3.117)$$

waarbij de Jordan-blokken vierkante *boven-triangulaire* matrices zijn, met de eigenwaarde λ op de diagonaal, en 1's op één positie boven de diagonalelementen:

$$\mathbf{J}_n(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 1 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{bmatrix} \quad \text{bvb.: } \mathbf{J}_3(\lambda) = \begin{bmatrix} \lambda & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix}. \quad (2.3.118)$$

Deze Jordan-decompositie laat ons tot slot nog toe van de volgende identiteiten af te leiden die gelden voor elke (al dan niet diagonaliseerbare) vierkante matrix:

$$\begin{aligned} \det(A) &= \lambda_1^{m_1} \lambda_2^{m_2} \dots && \text{(product eigenwaarden, rekening houdend met algebraïsche multiplicitet)} \\ \text{Tr}(A) &= \sum_i m_i \lambda_i && \text{(som eigenwaarden, rekening houdend met algebraïsche multiplicitet).} \end{aligned}$$

Voorbeeld 1: Geef voor de matrix

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & -3 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad (2.3.119)$$

de eigenwaarden, (rechter-)eigenvectoren, en linkereigenvectoren.

Oplossing. Met behulp van de JordanForm functie en MatrixInverse functie van \textcircled{C} Maple vinden we:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 1/2+i & 1/2-i \\ 0 & 0 & 3/2+i/2 & 3/2-i/2 \\ 0 & 0 & 1/2+i & 1/2-i \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1-i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1+i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2/5+i/5 & -1/5-3i/5 & 0 \\ 0 & 2/5-i/5 & -1/5+3i/5 & 0 \end{bmatrix}.$$

Hieruit lezen we de eigenwaarden af: $\lambda_1 = 2, \lambda_2 = 3, \lambda_3 = 1-i, \lambda_4 = 1+i$ en corresponderende (rechter)-eigenvectoren:

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 1/2+i \\ 3/2+i/2 \\ 1/2+i \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_4 = \begin{bmatrix} 1/2-i \\ 3/2-i/2 \\ 1/2-i \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (2.3.120)$$

en linker-eigenvectoren:

$$\mathbf{v}_{\mathbf{L}1} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_{\mathbf{L}2} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_{\mathbf{L}3} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2/5+i/5 \\ -1/5-3i/5 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_{\mathbf{L}4} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2/5-i/5 \\ -1/5+3i/5 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.3.121)$$

Voorbeeld 2: Geef voor de matrix

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad (2.3.122)$$

de eigenwaarden, en eigenvectoren. We vinden (opnieuw met Maple):

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (2.3.123)$$

Uit de Jordan-vorm (middelste matrix) zien we dat er twee verschillende eigenwaarden zijn: $\lambda_1 = 1$ en $\lambda_2 = 2$, waarbij de algebraïsche multipliciteit van λ_2 gelijk is aan drie en de geometrische multipliciteit gelijk aan twee. De eigenvector \mathbf{v}_1 horende bij λ_1 lezen we af in de eerste kolom van de eerste matrix (\mathbf{M}), de twee eigenvectoren \mathbf{v}_2 en \mathbf{v}_3 horende bij λ_2 lezen we af in kolom twee en kolom vier:

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.3.124)$$

(Uit de structuur van de Jordan-vorm volgt dat de derde kolomvector geen eigenvector is.)

2.3.4 Matrixmachten en iteratieve matrixvergelijkingen

Een belangrijke toepassing van de diagonalisatie of meer algemeen de Jordan-vorm is dat deze onmiddellijk toelaat van matrixmachten te nemen. Door $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M} = \mathbf{I}$ hebben we:

$$\mathbf{A}^k = \mathbf{MD}^k\mathbf{M}^{-1} \quad \text{of} \quad \mathbf{A}^k = \mathbf{MJ}^k\mathbf{M}^{-1}. \quad (2.3.125)$$

Voor de diagonaalmatrix is de macht triviaal:

$$\mathbf{D}^k = \begin{bmatrix} \lambda_1^k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2^k & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3^k & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda_n^k \end{bmatrix}. \quad (2.3.126)$$

In het geval van de Jordan-vorm krijgen we de machten van de afzonderlijke blokken. Zo'n n -dimensionale blok kunnen we schrijven als: $\mathbf{J}_n(\lambda) = \lambda\mathbf{I} + \mathbf{L}$, met \mathbf{L} de ladderoperator: $\mathbf{Le}_i = \mathbf{e}_{i-1}$, $\mathbf{Le}_1 = \mathbf{0}$ en dus $\mathbf{L}^n = \mathbf{0}$. Zo krijgen we, gebruik makend van de binomiaalexpansie:

$$(\mathbf{J}_n(\lambda))^k = \lambda^k\mathbf{I} + \sum_{p=1}^k \lambda^{k-p} \frac{k!}{(k-p)!p!} \mathbf{L}^p, \quad (2.3.127)$$

waarbij $\mathbf{L}^p = \mathbf{0}$ voor $p \geq n$.

Iteratieve matrixvergelijkingen. Bij een iteratief proces gegenereerd door een matrix \mathbf{A} starten we van een initiële vector \mathbf{u}_0 , die stap per stap verandert volgens $\mathbf{u}_k = \mathbf{Au}_{k-1}$. Zodoende hebben we:

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{A}^k \mathbf{u}_0 = \mathbf{MD}^k \mathbf{M}^{-1} \mathbf{u}_0, \quad (2.3.128)$$

waarbij we hier enkel het geval van een diagonaliseerbare matrix beschouwen.

Soms zijn we vooral geïnteresseerd in het **asymptotisch gedrag**: $\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{u}_k$. Om dit gedrag te bepalen schrijven we \mathbf{M} en \mathbf{M}^{-1} in termen van respectievelijk de rechter- en linkereigenvectoren (zie (2.3.110) en (2.3.115)) wat voor \mathbf{A} de volgende uitdrukking oplevert:

$$\mathbf{A} = \sum_i \lambda_i \mathbf{v}_i \mathbf{v}_{\mathbf{L}i}^T, \quad (2.3.129)$$

en waardoor (2.3.128) kan geschreven worden als:

$$\mathbf{u}_k = \left(\sum_i \lambda_i^k \mathbf{v}_i \mathbf{v}_{\mathbf{L}i}^T \right) \mathbf{u}_0 = \sum_i \lambda_i^k (\mathbf{v}_{\mathbf{L}i}^T \mathbf{u}_0) \mathbf{v}_i. \quad (2.3.130)$$

Indien er één dominante eigenwaarde is (die we zonder verlies van veralgemening index $i = 1$ geven) $|\lambda_1| > |\lambda_j|$ voor $j > 1$, en(!) indien \mathbf{u}_0 een niet-nul component in de richting van de dominante linker-eigenvector heeft: $\mathbf{v}_{\mathbf{L}1} \cdot \mathbf{u}_0 \neq 0$, dan vinden we zo het asymptotische gedrag:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{u}_k = \lambda_1^k (\mathbf{v}_{\mathbf{L}1} \cdot \mathbf{u}_0) \mathbf{v}_1. \quad (2.3.131)$$

We noemen \mathbf{v}_1 dan het *fixed point* (=vast punt): voor om het even welke initiële vector \mathbf{u}_0 (die een niet-nul component heeft volgens $\mathbf{v}_{\mathbf{L}1}$) komen we asymptotisch terecht bij een vector proportioneel met \mathbf{v}_1 .

Toepassing: De Fibonacci rij: $0, 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13 \dots$, is een bekende recursieve rij die blijkbaar terug te vinden is in allerhande processen in de natuur. Ze wordt bepaald door de recursie-relatie $x_k = x_{k-1} + x_{k-2}$, met als startvoorwaarden $x_0 = 0, x_1 = 1$. We kunnen hier als volgt een iteratieve matrixvergelijking aan associëren. Stellen we $\mathbf{u}_k = \begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix}$, dan hebben we $\mathbf{u}_k = \mathbf{A}\mathbf{u}_{k-1}$ met

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{1+\sqrt{5}}{2\sqrt{5}} \end{bmatrix} (= \mathbf{MDM}^{-1}), \quad (2.3.132)$$

waarbij we de matrix in de laatste gelijkheid, bvb. via Maple JordanForm diagoniseerden. Vervolgens vinden we uit (2.3.128):

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_k = \mathbf{MD}^k \mathbf{M}^{-1} \mathbf{u}_0 &= \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} & \frac{1-\sqrt{5}}{2} \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k & 0 \\ 0 & \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \quad (2.3.133) \\ &= \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{k+1} - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^{k+1} \\ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix} \approx \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{k+1} \\ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

waarbij de laatste gelijkheid benaderend geldt voor grote k . We vinden dus de uitdrukking

$$x_k = \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k - \left(\frac{1-\sqrt{5}}{2}\right)^k \right) \approx \frac{1}{\sqrt{5}} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k \quad (2.3.134)$$

voor de Fibonacci-getallen, alsook de asymptotische ratio $\lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1}/x_k = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ wat de beroemde gulden snede is.

Het asymptotisch gedrag (grote k) kunnen we ook rechtstreeks uit de dominante eigenvectoren en corresponderende eigenwaarde halen. Uit (2.3.132) lezen we af dat:

$$\mathbf{v}_1 = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}, 1\right) \quad \mathbf{v}_{\mathbf{L}1} = \left(\frac{1}{\sqrt{5}}, -\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}\right) \quad \lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}. \quad (2.3.135)$$

Uit (2.3.131) vinden we dan onmiddellijk het asymptotisch gedrag

$$\begin{bmatrix} x_{k+1} \\ x_k \end{bmatrix} \approx \lambda_1^k (\mathbf{v}_{\mathbf{L}1} \cdot \mathbf{u}_0) \mathbf{v}_1 = \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k \left(\frac{1}{\sqrt{5}}\right) \begin{bmatrix} \frac{1+\sqrt{5}}{2} \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^{k+1} \\ \left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)^k \end{bmatrix}, \quad (2.3.136)$$

wat precies overeenkomt met de laatste benaderde gelijkheid in (2.3.134). Wat de asymptotische ratio x_{k+1}/x_k betreft, vinden we ook onmiddellijk $\mathbf{u}_k \approx \lambda_1 \mathbf{u}_{k-1}$, waaruit $\lim_{k \rightarrow \infty} x_{k+1}/x_k = \lambda_1 = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$, consistent met het eerdere resultaat.

Toepassing: Markov proces. Een Markov proces, is een stochastisch proces zonder geheugen, waarbij een systeem zich in n toestanden s_i kan bevinden, en waarbij er voor elke stap een waarschijnlijkheid P_{ij} is, om van toestand s_j naar toestand s_i te gaan. P_{ij} bepaalt dan de stochastische matrix voor het Markov-proces, gegeven door

$$\mathbf{u}_k = \mathbf{P}\mathbf{u}_{k-1}, \quad (2.3.137)$$

met $\mathbf{u}_k = (p(k)_1, p(k)_2, \dots)$, de vector die na k stappen de waarschijnlijkheden voor de verschillende toestanden geeft. Waarschijnlijkheden sommeren noodzakelijkerwijs tot 1, zodoende: $\sum_i P_{ij} = 1$, de matrixelementen in elke kolom sommeren tot 1, verder zijn deze waarschijnlijkheden uiteraard positief $P_{ij} \geq 0$. Daardoor zullen de waarschijnlijkheden voor de verschillende toestanden, na elke tijdstap, ook positief zijn en sommeren tot 1: $\sum_i p(k)_i = 1$. Nu volgt uit het *Perron-Frobenius theorema* dat, wanneer voor dergelijke matrix alle elementen P_{ij} strikt positief zijn, of wanneer dat het geval is voor de matrixelementen van \mathbf{P}^k voor een bepaalde k , de matrix \mathbf{P} één unieke dominante eigenwaarde $\lambda_1 = 1$ heeft, met een eigenvector \mathbf{v}_1 die enkel positieve componenten heeft: $\mathbf{v}_1 = (v_1, v_2, \dots)$, met $v_i > 0$. Normeren we deze vector, $\mathbf{v}_1 \rightarrow \alpha\mathbf{v}_1$ zodat $\mathbf{v}_1 = (p_1, p_2, \dots)$ een waarschijnlijkhedsvector wordt ($\sum_i p_i = 1$), dan is het meteen duidelijk dat dit precies het fixed point $\mathbf{v}_1 = \mathbf{p}_f$ zal zijn van het Markov proces in kwestie (uit (2.3.131) weten we dat dit fixed point proportioneel moet zijn met \mathbf{v}_1 , anderzijds weten we dat \mathbf{u}_k voor elke k een waarschijnlijkhedsvector is):

$$\mathbf{P}^k \mathbf{u}_0 \xrightarrow{\lim k \rightarrow \infty} \mathbf{p}_f. \quad (2.3.138)$$

Hiermee hebben we ook meteen impliciet hebben aangetoond dat: $\mathbf{v}_{\mathbf{L}1} = (1, 1, 1, \dots, 1)$ voor deze normering van \mathbf{v}_1 (ga zelf na).

Markov-processen worden gebruikt voor de modellering van tal van probabilistische processen in de biologie, chemie, fysica, economie en informatietheorie. Een bekend voorbeeld is het originele Google page-rank algoritme (<https://nl.wikipedia.org/wiki/PageRank>) dat vertrekt van de modellering van het surfen op het world wide web als een Markov proces (zie een bordcollege). In onderstaand voorbeeld houden we het wat kleiner.

Voorbeeld. Neem volgend eenvoudig weermodel met 3 toestanden: zonnig, bewolkt en regen. En wanneer het zonnig is, een kans van 70% dat het de volgende dag ook zonnig is, 10% kans dat het bewolkt is, en 20% kans dat het regent. Wanneer het bewolkt is, 40% kans dat het zonnig wordt, 20% kans dat het bewolkt blijft, en 40% kans dat het de volgende dag regent. En wanneer het regent, 20% kans dat het de volgende dag zonnig wordt, 30% dat het bewolkt wordt, en 50% kans dat het zal regenen. Dit geeft de volgende Markov matrix:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0.7 & 0.4 & 0.2 \\ 0.1 & 0.2 & 0.3 \\ 0.2 & 0.4 & 0.5 \end{bmatrix}, \quad (2.3.139)$$

wat als dominante eigenvector met eigenwaarde $\lambda = 1$, $\mathbf{p}_f = (0.47, 0.19, 0.34)$ geeft, al bij al nog een redelijk zonnig land.

2.3.5 Matrixexponent en lineaire differentiaalvergelijkingen

De matrixexponent wordt gedefinieerd door de reeksontwikkeling (die altijd convergeert, zie (1.2.5) vorig hoofdstuk):

$$e^{\mathbf{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{A}^k. \quad (2.3.140)$$

Voor diagonaliseerbare matrices geeft dit dan:

$$e^{\mathbf{A}} = \mathbf{M} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \mathbf{D}^k \right) \mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M} e^{\mathbf{D}} \mathbf{M}^{-1}, \quad (2.3.141)$$

met $e^{\mathbf{D}} = \text{diag}(e^{\lambda_1}, e^{\lambda_2}, \dots)$ ⁸ Verder is het duidelijk dat voor algemene $t \in \mathbb{R}$ we dan krijgen dat

$$e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{M} e^{t\mathbf{D}} \mathbf{M}^{-1}, \quad (2.3.142)$$

met $e^{t\mathbf{D}} = (e^{t\lambda_1}, e^{t\lambda_2}, \dots)$.

Voor niet-diagonaliseerbare matrices, die enkel tot de meer algemene Jordan-vorm te herleiden zijn, krijgen we:

$$e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{M} e^{t\mathbf{J}} \mathbf{M}^{-1}, \quad (2.3.143)$$

waarbij we in de exponent van $t\mathbf{J}$ nu de exponent van de verschillende Jordan-blokken krijgen, met (zie (2.3.127)):

$$\begin{aligned} e^{t\mathbf{J}_n(\lambda)} &= \mathbf{I} + \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\lambda^k t^k}{k!} \mathbf{I} + \sum_{p=1}^k \lambda^{k-p} \frac{t^k}{(k-p)! p!} \mathbf{L}^p \right) \\ &= e^{\lambda t} \mathbf{I} + \sum_{p=1}^{n-1} \frac{\mathbf{L}^p}{p!} \sum_{k=p}^{\infty} \lambda^{k-p} \frac{t^k}{(k-p)!} \end{aligned} \quad (2.3.144)$$

$$= e^{t\lambda} \left(\mathbf{I} + \sum_{p=1}^{n-1} t^p \frac{\mathbf{L}^p}{p!} \right). \quad (2.3.145)$$

In matrixvorm wordt dit:

$$e^{t\mathbf{J}_n(\lambda)} = \begin{bmatrix} e^{t\lambda} & te^{t\lambda} & \frac{t^2}{2} e^{t\lambda} & \cdots & \frac{t^{n-1}}{(n-1)!} e^{t\lambda} \\ 0 & e^{t\lambda} & te^{t\lambda} & \cdots & \frac{t^{n-2}}{(n-2)!} e^{t\lambda} \\ 0 & 0 & e^{t\lambda} & \cdots & \frac{t^{n-3}}{(n-3)!} e^{t\lambda} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & e^{t\lambda} \end{bmatrix} \quad (2.3.146)$$

met als concrete voorbeeld nog:

$$e^{tJ_4(\lambda)} = \begin{bmatrix} e^{t\lambda} & te^{t\lambda} & \frac{t^2 e^{t\lambda}}{2} & \frac{t^3 e^{t\lambda}}{6} \\ 0 & e^{t\lambda} & te^{t\lambda} & \frac{t^2 e^{t\lambda}}{2} \\ 0 & 0 & e^{t\lambda} & te^{t\lambda} \\ 0 & 0 & 0 & e^{t\lambda} \end{bmatrix}$$

⁸Waarbij $\text{diag}(x_1, x_2, \dots)$ slaat op een diagonalmatrix, met de opeenvolgende diagonalelementen x_1, \dots

Bemerk: © Maple heeft ook de handige ingebouwde functie MatrixExponential(A, t), die onmiddellijk het resultaat $e^{t\mathbf{A}}$ geeft.

Toepassing: stelsel eerste-orde differentiaalvergelijkingen. Beschouw het volgend stelsel differentiaalvergelijkingen, voor $\mathbf{y}(t) = (y_1(t), y_2(t), \dots, y_n(t))$:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y}, \quad (2.3.147)$$

met als beginvoorwaarde $\mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$. Als veralgemening van de vergelijking in één variabele (zie §1.3.1) kunnen we de oplossing raden als:

$$\mathbf{y}(t) = e^{t\mathbf{A}}\mathbf{y}_0. \quad (2.3.148)$$

Als extra verificatie: bemerk dat $\frac{d}{dt}e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{A}e^{t\mathbf{A}}$, zoals je zelf kan aantonen uit de definitie (2.3.140), en dat $e^{0\mathbf{A}}\mathbf{y}_0 = \mathbf{I}\mathbf{y}_0 = \mathbf{y}_0$, zodat dit inderdaad de oplossing $\mathbf{y}(t)$ geeft, met de juiste beginvoorwaarde.

Toepassing: n -de orde differentiaalvergelijking met constante coëfficiënten. Beschouw volgende n -de orde differentiaalvergelijking:

$$y^{(n)}(t) + a_1y^{(n-1)}(t) + a_2y^{(n-2)}(t) + \dots + a_{n-1}y^{(1)}(t) + a_ny(t) = 0, \quad (2.3.149)$$

waarbij $y^{(k)}(t)$ slaat op de k -de afgeleide ($= \frac{d^k}{dt^k}y(t)$) en a_i bepaalde constante coëfficiënten zijn. Een strategie om deze vergelijking op te lossen, bestaat erin van deze te schrijven als een stelsel eerste-orde vergelijkingen (zie vorige toepassing). Hiertoe definiëren we de n -componentsvector

$$\mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} y^{(n-1)}(t) \\ y^{(n-2)}(t) \\ \vdots \\ y^{(1)}(t) \\ y(t) \end{bmatrix}, \quad (2.3.150)$$

wat ons toelaat van (2.3.149) te herschrijven als:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} y^{(n)}(t) \\ y^{(n-1)}(t) \\ \vdots \\ y^{(2)}(t) \\ y^{(1)}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a_1 & -a_2 & \dots & -a_{n-1} & -a_n \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y^{(n-1)}(t) \\ y^{(n-2)}(t) \\ \vdots \\ y^{(1)}(t) \\ y(t) \end{bmatrix}, \quad (2.3.151)$$

of dus $\frac{d}{dt}\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{y}$ met

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -a_1 & -a_2 & \dots & -a_{n-1} & -a_n \\ 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (2.3.152)$$

De oplossing met beginvoorwaarden $\mathbf{y}_0 = (y^{(n-1)}(0), y^{(n-2)}(0), \dots, y^{(1)}(0), y(0))$ leest dan:

$$\mathbf{y}(t) = e^{t\mathbf{A}}\mathbf{y}_0 , \quad (2.3.153)$$

waarbij we $y(t)$ kunnen aflezen in de n -de component van $\mathbf{y}(t)$.

Voorbeeld. Herschrijf de tweede-orde differentiaalvergelijking

$$y''(t) + \omega^2 y(t) = 0 , \quad (2.3.154)$$

als een lineair stelsel van eerste orde vergelijkingen, en los deze vervolgens op.

Oplossing: Met $\mathbf{y}(t) = (y'(t), y(t))$, kunnen we (2.3.154) herschrijven als:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} y'(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = \mathbf{A}\mathbf{y}(t) = \begin{bmatrix} 0 & -\omega^2 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y'(t) \\ y(t) \end{bmatrix} . \quad (2.3.155)$$

Verder vinden we:

$$e^{t\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \cos \omega t & -\omega \sin \omega t \\ \frac{1}{\omega} \sin \omega t & \cos \omega t \end{bmatrix} , \quad (2.3.156)$$

waaruit we de oplossing kunnen aflezen als tweede component van $\mathbf{y} = e^{t\mathbf{A}}\mathbf{y}_0$:

$$y(t) = y(0) \cos \omega t + \frac{y'(0)}{\omega} \sin \omega t , \quad (2.3.157)$$

wat inderdaad overeenkomt met de oplossing (1.3.23) die we in het vorige hoofdstuk poneerden.

2.3.6 Toepassing: normale modes voor gekoppelde deeltjes

Voor de coördinaten $y_i(t)$ van een stel deeltjes die paarsgewijs interageren volgens een 'veer-kracht': $F \propto -\Delta y$ (denk aan een stel massa's onderling verbonden door veren), hebben we generiek volgend stelsel differentiaalvergelijkingen:

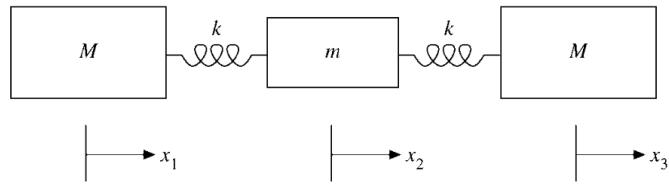
$$y_i''(t) = - \sum_j A_{ij} y_j(t) \quad \text{of} \quad \mathbf{y}''(t) = -\mathbf{A}\mathbf{y}(t) \quad (2.3.158)$$

waarbij de matrix \mathbf{A} diagonaliseerbaar is en positieve eigenwaarden $\lambda_k \geq 0$ heeft. Om (2.3.158) op te lossen, schrijven we $\mathbf{y}(t)$ op elk tijdstip uit in de eigenbasis van \mathbf{A} :

$$\mathbf{y}(t) = \sum_k x_k(t) \mathbf{v}_k , \quad (2.3.159)$$

met $\mathbf{A}\mathbf{v}_k = \lambda_k \mathbf{v}_k = \omega_k^2 \mathbf{v}_k$. Bemerk dat aangezien \mathbf{A} diagonaliseerbaar is, deze eigenbasis de volledige vectorruimte \mathbb{R}^n opspant, zodat (2.3.159) (op elk moment) in alle algemeenheid geldt. Pluggen we deze vorm in (2.3.158) dan vinden we, door het identificeren van de coëfficiënten van de verschillende eigenvectoren aan beide zijden van de vergelijking, dat voor een algemene oplossing

$$x_k''(t) = -\omega_k^2 x_k(t) , \quad (2.3.160)$$



Figuur 2.6: Gesimplificeerd model van een CO_2 molecule: drie door veren gekoppelde massa's die in één richting kunnen trillen.

of dus:

$$x_k(t) = a_k \cos(\omega_k t) + b_k \sin(\omega_k t), \quad (2.3.161)$$

met de constantes a_k en b_k bepaalt door de beginvoorwaarden.

De oplossingen $\mathbf{y}_k(t) = x_k(t)\mathbf{v}_k$ noemen we de **normale modes**, met **eigenfrequenties** ω_k (=hoekfrequentie, $\omega_k = 2\pi f_k$ met f_k de frequentie). Deze normale modes en eigenfrequenties van een systeem zijn fysisch van belang, niet alleen omdat ze een manier geven om de algemene oplossing uit te drukken, maar ook omdat ze resonant geëxciteerd worden door periodieke brontermen met hoekfrequentie $\omega \approx \omega_k$ (zie later in hoofdstuk 5). Als voorbeeld vermelden we de resonante trillingsfrequenties van moleculen opgevat als een klassiek systeem van door veerkrachten verbonden atomen (in benadering van kleine relatieve trillingen van de atomen ten opzichte van hun rustpositie). De eigenfrequenties bepalen dan welk deel van het lichtspectrum dominant zal geabsorbeerd worden onder de vorm van trillingsenergie.

Voorbeeld. Beschouw het vereenvoudigd 1D model van een CO_2 molecule geschetst in fig. 2.6, waarbij de twee zuurstofatomen met massa M verbonden zijn met het middelste koolstofatoom (massa m), met veerkrachten bepaald door de veerconstante k . Toon aan dat we voor de posities (x_1, x_2, x_3) , bepaald ten opzichte van de drie rustposities, inderdaad een stel vergelijkingen van de vorm (2.3.158) krijgen.⁹ Bepaal vervolgens de eigenfrequenties en normale modes, en interpreteer de gevonden eignentrillingen.

Oplossing: De drie bewegingsvergelijkingen lezen:

$$\ddot{x}_1 = -\frac{k}{M}(x_1 - x_2) \quad (2.3.162)$$

$$\ddot{x}_2 = -\frac{k}{m}(x_2 - x_1) - \frac{k}{m}(x_2 - x_3) \quad (2.3.162)$$

$$\ddot{x}_3 = -\frac{k}{M}(x_3 - x_2), \quad (2.3.163)$$

⁹Hier zijn de x'_i 's de coördinaten, NIET de coëfficiënten ten opzichte van de eigenbasis.

waaruit we onmiddellijk aflezen dat

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{k}{M} & -\frac{k}{M} & 0 \\ -\frac{k}{m} & \frac{2k}{m} & -\frac{k}{m} \\ 0 & -\frac{k}{M} & \frac{k}{M} \end{bmatrix}. \quad (2.3.164)$$

Voor de eigenfrequenties vinden we dan:

$$\omega^2 = 0, \quad \frac{k}{M} \quad \text{en} \quad \frac{k}{M} + \frac{2k}{m}, \quad (2.3.165)$$

Met respectievelijke eigenvectoren:

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} \quad \text{en} \quad \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{2M}{m} \\ 1 \end{bmatrix} \quad (2.3.166)$$

De eerste mode is een nul-mode ($\omega^2 = 0$), deze beschrijft de vrije beweging van de volledige molecule, zonder enige relatieve trilling: $x_i(t) = a + vt$. Bij de tweede normale mode trillen de buitenste atomen in tegengestelde richting, terwijl het middelste atoom stationair blijft. Ook het massamiddelpunt $x_{m.m.} = (M(x_1 + x_3) + mx_2)/(2M + m)$ is stationair. Bij de derde normale mode trillen de buitenste atomen samen in dezelfde richting en het middelste atoom in tegengestelde richting, opnieuw zonder dat het massamiddelpunt beweegt.

2.4 Symmetrische matrices

Een klasse van matrices die op een natuurlijke manier verschijnen bij tal van modellen, zijn de symmetrische matrices, gedefinieerd door:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T. \quad (2.4.167)$$

Dergelijke matrices hebben een aantal bijzondere eigenschappen:

- **Reële eigenwaarden:**

Neem een eigenvector \mathbf{v}_i met eigenwaarde λ_i . We definiëren nu de **hermitisch toegevoegde** van een matrixuitdrukking als de uitdrukking met de componenten getransponeerd en complex toegevoegd $(\dots)^\dagger = \overline{(\dots)}^T$, met dus bijvoorbeeld:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^\dagger &= \overline{\mathbf{A}}^T = \mathbf{A} && (\text{laatste gelijkheid geldig voor reële symmetrische } \mathbf{A}) \\ \mathbf{v}^\dagger &= \overline{\mathbf{v}}^T = [\bar{v}_1 \quad \bar{v}_2 \quad \dots \quad \bar{v}_n]. && (2.4.168) \end{aligned}$$

Met deze definitie kunnen we enerzijds schrijven:

$$\mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{A} \mathbf{v}_i = \lambda_i \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_i. \quad (2.4.169)$$

Anderzijds, door het complex toegevoegde te nemen van zowel linker- als rechterlid (en gebruik te maken van $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$, en de algemene eigenschap $(AB)^T = B^T A^T$ of dus $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$) vinden we:

$$\overline{\mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{A} \mathbf{v}_i} = (\mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{A} \mathbf{v}_i)^\dagger = \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{A} \mathbf{v}_i = \bar{\lambda}_i \mathbf{v}_i^\dagger \mathbf{v}_i \quad (2.4.170)$$

waaruit we dan $\lambda_i = \bar{\lambda}_i$ kunnen aflezen. We vinden dus dat een symmetrische reële matrix altijd reële eigenwaarden heeft. En daardoor ook reële eigenvectoren.

- **Orthogonale eigenvectoren:**

Nemen we twee eigenvectoren \mathbf{v}_i en \mathbf{v}_j met eigenwaarden λ_i en λ_j dan hebben we, wegens $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$:

$$\mathbf{v}_i^T \mathbf{A} \mathbf{v}_j = \lambda_j \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = \lambda_i \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j , \quad (2.4.171)$$

en zodus

$$\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = 0 \quad \text{wanneer } \lambda_i \neq \lambda_j \quad (2.4.172)$$

- **Diagonaliseerbaar door orthogonale matrices:**

Men kan aantonen dat voor symmetrische matrices de algebraïsche multipliciteiten altijd samenvallen met de geometrische multipliciteiten waardoor deze dus steeds diagonaliseerbaar zijn. Verder kunnen we de eigenvectoren altijd orthonormaal kiezen: $\mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$ door een geschikte normering en eventueel een Gramm-Schmidt orthogonalisatie bij ontaarde eigenvectoren met gelijke eigenwaarden. Schrijven we $\mathbf{O} = [\mathbf{v}_1 \ \mathbf{v}_2 \ \dots \ \mathbf{v}_n]$ dan hebben we dus:

$$(\mathbf{O}^T \mathbf{O})_{ij} = \mathbf{v}_i^T \mathbf{v}_j = \delta_{ij} , \quad (2.4.173)$$

en zodus:

$$\boxed{\mathbf{O}^T \mathbf{O} = \mathbf{O} \mathbf{O}^T = \mathbf{I}} \quad (2.4.174)$$

Dergelijke matrices, waarvan de inverse gelijk is aan de getransponeerde noemen we orthogonale matrices. Voor een symmetrische matrix hebben we dus algemeen dat deze gediagonaliseerd wordt door een dergelijke orthogonale matrix:

$$\mathbf{A} = \mathbf{O} \mathbf{D} \mathbf{O}^T . \quad (2.4.175)$$

2.4.1 Orthogonale matrices en rotaties

Orthogonale transformaties $\mathbf{x}' = \mathbf{O}\mathbf{x}$ behouden het inproduct:

$$\mathbf{x}_1'^T \mathbf{x}_2' = \mathbf{x}_1^T \mathbf{O}^T \mathbf{O} \mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1^T \mathbf{x}_2 . \quad (2.4.176)$$

Nemen we voor punten P in de Euclidische ruimte cartesische coördinaten (x_1, x_2, \dots, x_n) dan hebben dergelijke transformaties een duidelijke geometrische betekenis: ze behouden zowel de hoeken als de lengtes ($\|\mathbf{x}\|$), het zijn met andere woorden **rotaties**, **spiegelingen** of combinaties ervan.

Zo hebben we voor de orthogonale transformaties in 3D, enerzijds de puntspiegeling, $\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}$:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} (= -\mathbf{I}). \quad (2.4.177)$$

Anderzijds hebben we de rotaties, bvb. voor de rotaties rond de x -, y -, en z -as:

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_x(\theta) &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \\ \mathbf{R}_y(\theta) &= \begin{bmatrix} \cos \theta & 0 & \sin \theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta & 0 & \cos \theta \end{bmatrix} \\ \mathbf{R}_z(\theta) &= \begin{bmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.4.178)$$

Een algemene rotatie kan worden geparameteriseerd volgens drie Eulerhoeken $\{\theta_i\}$, als $\mathbf{A}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \mathbf{R}_z(\theta_3)\mathbf{R}_x(\theta_2)\mathbf{R}_z(\theta_1)$ ¹⁰:

$$\mathbf{A}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \begin{bmatrix} c_3c_1 - c_2s_3s_1 & -c_3s_1 - c_2c_1s_3 & s_3s_2 \\ c_1s_3 + c_3c_2s_1 & c_3c_2c_1 - s_3s_1 & -c_3s_2 \\ s_2s_1 & c_1s_1 & c_2 \end{bmatrix} \quad (2.4.179)$$

met $c_i = \cos \theta_i$, $s_i = \sin \theta_i$. Een algemene orthogonale transformatie in 3D is dan van deze vorm, of van de vorm \mathbf{PA} , waarbij we de algemene rotatie laten volgen door een puntspiegeling.

Het spreekt voor zich dat de 3D orthogonale transformaties (in het bijzonder rotaties) van cruciaal belang zijn bij alles waar 3D modellering nodig is, denk aan de beweging van starre lichamen (bvb. vliegtuigen), denk ook aan alles van CGI toepassingen (films, games). Een bekend probleem met de Euler-parametrisatie is de *Gimbal-lock* die optreedt wanneer hoeken onbepaald worden. Voor de specifieke keuze (2.4.179) treedt dit op wanneer $\theta_2 = 0$, i.e. voor rotaties rond de z -as. Voor deze rotaties is enkel de som $\theta = \theta_1 + \theta_3$ bepaald. In het bijzonder geeft dit problemen wanneer interpolaties tussen verschillende rotaties (en dus verschillende Eulerhoeken) worden gebruikt. In §2.6.2 geven we een alternatieve manier om 3D rotaties te implementeren, waarvoor de Gimbal-lock niet optreedt.

2.5 Singuliere waardendecompositie

We verlaten nu het terrein van de strikt vierkante matrices en beschouwen opnieuw algemene $(m \times n)$ matrices \mathbf{A} . De singuliere waardendecompositie (SVD=*singular value*

¹⁰Andere gelijkwaardige keuzes zijn $\mathbf{A}(\theta_3, \theta_2, \theta_1) = \mathbf{R}_z(\theta_3)\mathbf{R}_y(\theta_2)\mathbf{R}_z(\theta_1)$ of $\mathbf{A}(\theta_3, \theta_2, \theta_1) = \mathbf{R}_x(\theta_3)\mathbf{R}_y(\theta_2)\mathbf{R}_z(\theta_1)$. In het laatste geval spreekt men soms ook nog over Tait-Bryan hoeken.

(*decomposition*) is een soort equivalent van een diagonalisatie van een symmetrische matrix, maar dan voor een algemene matrix. De SVD schrijft een algemene $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ matrixtransformatie als de samenstelling van eerst een orthogonale transformatie \mathbf{V}^T in \mathbb{R}^n , gevolgd door een *dilatatie* $\Sigma : x_i \rightarrow \sigma_i x_i$, met $\sigma_i \geq 0$, met tot slot daarna opnieuw een orthogonale transformatie \mathbf{U} , maar dan in \mathbb{R}^m . Uitgeschreven als een matrixvergelijking: elke $(m \times n)$ reële matrix heeft een SVD uitdrukking:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T, \quad (2.5.180)$$

met \mathbf{U}, \mathbf{V} respectievelijk een orthogonale $(m \times m)$ en $(n \times n)$ matrix, en Σ een $(m \times n)$ diagonaalmatrix: $\Sigma_{ij} = 0$ voor $i \neq j$ en $\Sigma_{ii} = \sigma_i \geq 0$). Deze diagonalelementen noemen we de **singuliere waarden**. Voor een rang r matrix, zijn er precies r singuliere waarden verschillend van nul, en typisch nemen we de singuliere waarden in aflopende volgorde $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$. Verder is het interessant om de SVD expliciet uit te schrijven in termen van de orthonormale kolom en rij-vectoren van respectievelijk \mathbf{U} en \mathbf{V}^T :

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T, \quad (2.5.181)$$

bemerkt dat de som hier niet noodzakelijk loopt over al de m (n) vectoren van \mathbf{U} (\mathbf{V}); de extra $m - r$ ($n - r$) vectoren spelen geen rol in de SVD.

Bewijs: We geven hier kort een constructief bewijs voor de SVD. Deze valt terug te brengen tot de diagonalisatie van de vierkante matrix $(n \times n)$ matrix $\mathbf{B} = \mathbf{A}^T \mathbf{A}$. Je kan vooreerst makkelijk nagaan dat deze matrix symmetrisch en semi-positief definit is, zodat die orthonormale eigenvectoren \mathbf{v}_i heeft, en positieve eigenwaarden $\sigma_i^2 \geq 0$: $\mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{v}_i = \sigma_i^2 \mathbf{v}_i$. Vervolgens definiëren we voor $\sigma_i \neq 0$ de m -component vectoren $\mathbf{u}_i = \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{A} \mathbf{v}_i$. Deze zijn opnieuw orthonormaal: $\mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_j = \frac{1}{\sigma_i \sigma_j} \mathbf{v}_i^T \mathbf{A}^T \mathbf{A} \mathbf{v}_j = \delta_{ij}$. Aangezien de orthonormale basis $\{\mathbf{v}_i\}$ compleet is (i.e. \mathbb{R}^n volledig opspant), en een matrixtransformatie volledig wordt bepaald door zijn inwerking op n lineaire onafhankelijke componenten, vinden we inderdaad (2.5.181) terug \square .

2.5.1 Toepassing: data-compressie via principal components

SVD's spelen een cruciale rol, daar waar grote matrices dienen *gecomprimeerd* te worden. Dit is het geval bij signaalverwerking, beeldanalyse, statistiek, kwantumveeldeeltjessimulaties, ... - essentieel overall waar datacompressie aan de orde is. Hierbij tracht men de data te comprimeren op zo'n manier dat de relevante informatie zo goed mogelijk behouden blijft.

Concreet bestaat een SVD compressie erin van de som over de singuliere waarden in (2.5.181) te trunceren tot de $r' < r$ grootste singuliere waarden:

$$\boxed{\mathbf{A} \approx \mathbf{A}' = \sum_{i=1}^{r'} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T}. \quad (2.5.182)$$

Men kan bewijzen (het Eckart-Young theorema) dat deze benadering in zekere zin optimaal is. Zo geldt o.a. dat \mathbf{A}' de rang r' benadering geeft die $\sum_{ij} (A_{ij} - A'_{ij})^2$ minimaliseert.

Stel nu dat we een set van meerdimensionele data $\mathbf{y}_j \in \mathbb{R}^m$ ($j = 1, \dots, n$) willen comprimeren. Denk bijvoorbeeld aan een reeks van n beelden, waarbij elk beeld bestaat uit m pixels. Combineren we deze data tot de $(m \times n)$ matrix,

$$\mathbf{A} = [\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \dots \ \mathbf{y}_n] , \quad (2.5.183)$$

dan levert de SVD compressie (2.5.182) ons:

$$[\mathbf{y}_1 \ \mathbf{y}_2 \ \dots \ \mathbf{y}_n] \approx [\mathbf{y}'_1 \ \mathbf{y}'_2 \ \dots \ \mathbf{y}'_n] = \sum_{i=1}^{r'} \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T . \quad (2.5.184)$$

Onze originele data bestaat uit $m \times n$ getallen, de compressie (2.5.184) brengt dit tot $r' \times (n + m)$ getallen (voor elk van de r' termen in de som (2.5.184) hebben we n componenten van de vector $\sigma_i \mathbf{v}_i$ en m componenten van de vector \mathbf{u}_i .) Typisch nemen we $r' \ll m \ll n$, waardoor dit inderdaad een serieuze reductie betekent.

Voor een individuele data-vector \mathbf{y}_j , leest de compressie (2.5.184):

$$\mathbf{y}_j \approx \mathbf{y}'_j = \sum_{i=1}^{r'} b_{ji} \mathbf{u}_i , \quad (2.5.185)$$

met b_{ji} de j -de component van $\sigma_i \mathbf{v}_i$. Als dusdanig zien we dat de SVD compressie ons een basis van r' vectoren $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_{r'})$ levert, zodat elk van de data-vectoren goed kan benaderd worden als een lineaire combinatie van dit beperkt aantal basisvectoren. Deze basisvectoren \mathbf{u}_i worden de *principal components* genoemd. Deze principal components spelen niet alleen een cruciale rol in de compressie, maar zijn ook zeer nuttig bij de analyse van data. Men spreekt dan over *principal component analyse* (PCA).

2.6 Complexe vectorruimtes en matrices

In deze sectie beschouwen we complexe matrices en vectoren. Zoals reeds opgemerkt, bij de diagonalisatie van arbitraire reële matrices, krijgen we daar soms al te maken met complexe eigenwaarden (wegen de hoofdstelling van de algebra) en daardoor complexe eigenvectoren. In die zin is de lineaire algebra over het veld \mathbb{C} meer elegant (en volledig). We bespreken hier kort, hoe de verschillende bovenstaande resultaten en definities veranderen wanneer we complexe getallen beschouwen.

- **Hermitisch toegevoegde.** In de plaats van de getransponeerde $(\dots)^T$ is het meer natuurlijk van de hermitisch toegevoegde te gebruiken:

$$A_{ij}^\dagger = \overline{A}_{ji} = \overline{A}_{ij}^T , \quad (2.6.186)$$

waarbij we naast het nemen van de getransponeerde ook nog de componenten complex toevoegen. Bemerkt dat voor reële matrices $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^\dagger$. Ook nog: voor algemene matrices hebben we: $(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger$

- **Hermitisch inproduct.** Daarbij aansluitend is het ook aangewezen van het hermitisch inproduct en de daarbijhorende norm te definiëren als:

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{u}^\dagger \mathbf{v} = \sum_i \bar{u}_i v_i \quad \|\mathbf{u}\| = \sqrt{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}} = \left(\sum_i \bar{u}_i u_i \right)^{1/2}. \quad (2.6.187)$$

Dit inproduct blijft voldoen aan de Cauchy-Schwarz ongelijkheid, $|\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}| \leq \|\mathbf{u}\| \|\mathbf{v}\|$, en de norm is positief, $\|\mathbf{u}\| = 0 \rightarrow \mathbf{u} = \mathbf{0}$. Bemerk dat dit zich voor reële vectoren tot de vorige definities herleidt.

- **Dimensie, lineaire onafhankelijkheid, rang, ...** Deze worden allemaal analoog gedefineerd als voor het reële geval, waarbij we nu complexe lineaire combinatie beschouwen. Zo is de complexe dimensie van \mathbb{C}^2 bijvoorbeeld 2, we vinden al de complexe 2D-vectoren als $\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}$ voor complexe getallen a en b . Bemerk dat er 4 reële getallen nodig zijn - het reël en imaginair deel van a en b - om deze vectorruimte te beschrijven.
- **Orthogonaliteit, orthonormaliteit en projectie.** Orthogonaliteit, orthonormaliteit en de daaruitvolgende Gramm-Schmidt decompositie wordt nu gedefinieerd met het Hermitisch inproduct. Voor een orthonormaal stel basisvectoren hebben we dan: $\mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_l = \delta_{kl}$. Ook bij de uitdrukking voor de projector op een deelvectorruimte, moeten we 'T' vervangen door '†'. Zo krijgen we dus:

$$\mathbf{y}^\parallel = \mathbf{P}\mathbf{y} \quad \text{met} \quad \mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^\dagger \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^\dagger,$$

voor de projector op de subruimte opgespannen door de complexe basisvectoren $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1 \ \mathbf{a}_2 \ \dots \ \mathbf{a}_r]$. Verder geldt nu dat elke **hermitische** matrix, waarvoor $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$, een projector is op een bepaalde complexe deelvectorruimte.

- **Diagonalisatie hermitische matrices.** Algemene complexe matrices zullen nog steeds door een complexe basistransformatie naar een diagonaalvorm of Jordan-vorm kunnen gebracht worden. Als veralgemening van de reële symmetrische matrices die gediagonaliseerd worden door orthogonale transformaties, krijgen we nu **hermitische matrices**, gedefinieerd door:

$$\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}, \quad (2.6.188)$$

deze kunnen algemeen worden gediagonaliseerd door unitaire matrices:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{D} \mathbf{U}^\dagger, \quad (2.6.189)$$

met $\mathbf{D} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots)$ een diagonalmatrix met reële (!) eigenwaarden λ_i en \mathbf{U} een **unitaire matrix** die per definitie voldoet aan:

$$\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1 \ \mathbf{u}_2 \ \dots \ \mathbf{u}_n] \quad \text{met} \quad \mathbf{u}_i^\dagger \mathbf{u}_j = \delta_{ij}, \quad (2.6.190)$$

of equivalent:

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbf{I}. \quad (2.6.191)$$

- **Singuliere waarden decompositie.** Een algemene complexe $(m \times n)$ matrix \mathbf{A} kan geschreven worden als:

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^\dagger, \quad (2.6.192)$$

met \mathbf{U}, \mathbf{V} respectievelijk een unitaire $(m \times m)$ en $(n \times n)$ matrix, en Σ een reële $(m \times n)$ diagonaalmatrix: $\Sigma_{ij} = 0$ voor $i \neq j$ en $\Sigma_{ii} = \sigma_i \geq 0$.

2.6.1 Toepassing: de Jones-matrix voor optische elementen

In de toepassingen met complexe getallen §1.4.5, zagen we dat de polarisatie van een vlakke lichtgolf propagerend in de z -richting wordt bepaald door een complexe 2-component vector $\vec{\epsilon} = (\epsilon_x, \epsilon_y)$, waarbij bvb. voor een lineair gepolariseerde golf onder hoek θ met de x -as: $\vec{\epsilon} = (\cos \theta, \sin \theta)e^{i\alpha}$. (Bemerkt dat de extra fase $e^{i\alpha}$ die we hier toevoegen kan geabsorbeerd worden in een verschuiving van de tijd: $t \rightarrow t + \alpha/(kc)$.) Voor een links/rechts circulair gepolariseerde golf hebben we: $\vec{\epsilon} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1, \pm i)e^{i\alpha}$.

Het effect van optische elementen (spiegels, *polarizers*, *waveplates*, ...) op de polarisatie van een laserstraal kan dan worden uitgedrukt als een matrixtransformatie, met een zogenaamde Jones-matrix:

$$\begin{bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \end{bmatrix}. \quad (2.6.193)$$

Zo heeft men bijvoorbeeld voor een $1/n$ -waveplate, met de snelle as georiënteerd in de x -richting (en de trage as in de y -richting) de Jones-matrix:

$$\mathbf{W}_{\theta=0} = e^{-\frac{i\pi}{n}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{2\pi}{n}} \end{bmatrix}. \quad (2.6.194)$$

Een logische vraag is dan wat de Jones-matrix is wanneer we de waveplate draaien over een hoek θ zodat de snelle as nu ligt volgens $\vec{e}'_x = (\cos \theta, \sin \theta)$ en de trage as volgens $\vec{e}'_y = (-\sin \theta, \cos \theta)$. Het antwoord volgt makkelijk uit een basistransformatie (zie §2.3.2, in bijzonder het voorbeeld). In de geroteerde (\vec{e}'_x, \vec{e}'_y) basis heeft \mathbf{W}' de exacte uitdrukking (2.6.194), zodat we voor \mathbf{W} in de originele basis (\vec{e}_x, \vec{e}_y) vinden (met $c = \cos \theta$, $s = \sin \theta$):

$$\mathbf{W}_\theta = \mathbf{M}\mathbf{W}_{\theta=0}\mathbf{M}^T = e^{-\frac{i\pi}{n}} \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\frac{2\pi}{n}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = e^{-\frac{i\pi}{n}} \begin{bmatrix} c^2 + e^{i\frac{2\pi}{n}}s^2 & (1 - e^{i\frac{2\pi}{n}})cs \\ (1 - e^{i\frac{2\pi}{n}})cs & s^2 + e^{i\frac{2\pi}{n}}c^2 \end{bmatrix}. \quad (2.6.195)$$

Zo kan je nu bijvoorbeeld expliciet berekenen dat een lineaire polarisatie over een hoek φ : $\vec{\epsilon} = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ door een kwart waveplate ($n=4$), gedraaid over een hoek $\theta = \varphi + \pi/4$, wordt omgezet in een circulaire polarisatie.

Voorbeeld. Als extra voorbeeld beschouwen we de polarizer \mathbf{P}_θ , die enkel de component van $\vec{\epsilon}$ doorlaat die georiënteerd is volgens een bepaalde richting. Zo hebben we

bijvoorbeeld:

$$\mathbf{P}_{\theta=0} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (2.6.196)$$

met deze orientatie van de polarizer wordt enkel de x -component van de polarisatie doorgelaten. Draaien we deze polarizer over een hoek θ , dan wordt enkel de component gelegen volgens $\vec{e}'_x = (\cos \theta, \sin \theta)$ doorgelaten. We vinden, analoog als hierboven:

$$\mathbf{P}_\theta = \mathbf{M}\mathbf{P}_{\theta=0}\mathbf{M}^T = \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos^2 \theta & \cos \theta \sin \theta \\ \cos \theta \sin \theta & \sin^2 \theta \end{bmatrix}, \quad (2.6.197)$$

voor de matrixtransformatie die overeenkomt met deze geroteerde polarizer.

De 'magie' van lichtpolarisatie komt tevoorschijn wanneer we verschillende polarizers combineren, door ze na elkaar zetten. Zo hebben we $\mathbf{P}_{\pi/2}\mathbf{P}_0 = \mathbf{0}$: de opeenvolging van twee polarizers, waarvan de tweede 90° gedraaid is t.o.v. de eerste, dooft alle licht. Zetten we nu echter een derde polarizer tussen de eerste twee, dan gaat er terug licht door(!): $\mathbf{P}_{\pi/2}\mathbf{P}_{\pi/4}\mathbf{P}_0 = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1/2 & 0 \end{bmatrix}$. Deze magie ligt hem dus in het feit dat de polarisatie een vector is en dat verschillende matrices, hier in het bijzonder $\mathbf{P}_{\pi/2}$ en $\mathbf{P}_{\pi/4}$, niet hoeven te commuteren.

2.6.2 Toepassing: 3D rotaties met Pauli-matrices (of quaternioen)

De Pauli-matrices spelen een cruciale rol in de kwantumfysica, ze beschrijven de spin van zogenaamde spin 1/2 deeltjes, als het elektron, proton, neutron of het quark. En hiermee samengaan geven ze ook een manier om 3D rotaties te beschrijven. Het is deze laatste toepassing - vandaag gebruikt in state-of-the-art computer graphics toepassingen - die we hier bespreken. Laat ons beginnen met de uitdrukkingen voor de drie Pauli-matrices:

$$\sigma_1 = \sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (2.6.198)$$

Het blijkt nu dat wanneer we aan een vector \vec{x} een matrix $\vec{x} \cdot \vec{\sigma} = \sum_i x_i \sigma_i$ associëren, de rotatie van $\vec{x} \rightarrow \vec{x}(\theta)$ over een hoek θ rond de as met eenheidsvector \vec{n} gevonden wordt als:

$$\boxed{\vec{x}(\theta) \cdot \vec{\sigma} = \left(\cos \frac{\theta}{2} \mathbf{I} - i \sin \frac{\theta}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \right) (\vec{x} \cdot \vec{\sigma}) \left(\cos \frac{\theta}{2} \mathbf{I} + i \sin \frac{\theta}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma} \right)}. \quad (2.6.199)$$

Het bewijs van deze formule is een mooie formele oefening in matrixrekening. Om te beginnen geven we enkele eigenschappen van de Pauli-matrices:

- De Pauli-matrices zijn hermitisch: $\sigma_i = \sigma_i^\dagger$ en spoorloos: $Tr(\sigma_i) = 0$. En elke hermitische spoorloze matrix \mathbf{A} (met dus $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ en $Tr(\mathbf{A}) = 0$) kan geschreven worden als een lineaire combinatie:

$$\mathbf{A} = c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3 = \begin{bmatrix} c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & -c_3 \end{bmatrix}. \quad (2.6.200)$$

- Het product van twee Pauli-matrices geeft:

$$\sigma_i \sigma_j = \sum_k (i \epsilon_{ijk} \sigma_k) + \delta_{ij} \mathbf{I}, \quad (2.6.201)$$

met ϵ_{ijk} het 3D Levi-Cevita symbool (zie vergelijking (2.3.85)).

We bewijzen nu eerst:

$$\vec{x}(\theta) \cdot \vec{\sigma} = e^{-i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}} (\vec{x} \cdot \vec{\sigma}) e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}}. \quad (2.6.202)$$

Noteren we $\mathbf{U}(\theta, \vec{n}) = e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}}$ dan zien we dat dit een unitaire matrix is

$$\mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger = e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}} \cdot e^{-i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}} = e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma} - i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}} = e^0 = \mathbf{I} \quad (2.6.203)$$

(Bemerkt dat in het algemeen $e^{\mathbf{A}} e^{\mathbf{B}} \neq e^{\mathbf{A} + \mathbf{B}}$, tenzij de matrices commuteren.) Zo zien we makkelijk dat

$$Tr(\mathbf{U}^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \mathbf{U}) = Tr(\vec{x} \cdot \vec{\sigma} \mathbf{U} \mathbf{U}^\dagger) = Tr(\vec{x} \cdot \vec{\sigma}) = 0 \quad (2.6.204)$$

$$\text{en } (\mathbf{U}^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \mathbf{U})^\dagger = (\mathbf{U}^\dagger \vec{x} \cdot \vec{\sigma} \mathbf{U}), \quad (2.6.205)$$

het rechterlid van (2.6.202) is dus spoorloos en hermitisch zodat het linkerlid inderdaad een lineaire combinatie van Pauli-matrices is. Nu hebben we ook algemeen voor de afgeleide van de matrixexponent:

$$\frac{d}{dt} e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{A} e^{t\mathbf{A}} = e^{t\mathbf{A}} \mathbf{A}, \quad (2.6.206)$$

zoals je zelf kan aantonen uit de definitie (2.3.140). Dit laat ons toe om voor de uitdrukking (2.6.202) de afgeleide $\frac{d}{d\theta} \vec{x}(\theta) = \vec{x}'(\theta)$ te bepalen:

$$\vec{x}'(\theta) \cdot \sigma = -\frac{i}{2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{x}(\theta) \cdot \sigma) + \frac{i}{2} (\vec{x}(\theta) \cdot \sigma) (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}). \quad (2.6.207)$$

Of uitgeschreven in componenten (na toepassing van (2.6.201) en rekening houdend met $\epsilon_{jkl} = -\epsilon_{kjl}$):

$$\sum_l x'_l \sigma_l = \sum_{jkl} \epsilon_{jkl} n_j x_k \sigma_l, \quad (2.6.208)$$

waaruit

$$x'_l = \sum_{jk} \epsilon_{jkl} n_j x_k \quad \rightarrow \quad \frac{d}{d\theta} \vec{x} = \vec{x}' = \vec{n} \times \vec{x}, \quad (2.6.209)$$

waar we voor de laatste gelijkheid het vectorproduct al introduceren, vooruitlopend op hoofdstuk 4. Men kan aantonen (verifieer dit bvb. voor een rotatie rond de z -as) dat dit de uitdrukking is voor de afgeleide naar de rotatiehoek van de geroteerde vector. Verder hebben we $\vec{x}(0) = \vec{x}$, zodat we (2.6.202) bewezen hebben. Tot slot schrijven we

nog (gebruik makend van $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbf{I}$):

$$\begin{aligned}
 e^{i\frac{\theta}{2}\vec{n} \cdot \vec{\sigma}} &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{p!} i^p \left(\frac{\theta}{2}\right)^p (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^p \\
 &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p)!} i^{2p} \left(\frac{\theta}{2}\right)^{2p} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2p} + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{(2p+1)!} i^{2p+1} \left(\frac{\theta}{2}\right)^{2p+1} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^{2p+1} \\
 &= \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{1}{(2p)!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^{2p} \mathbf{I} + i \sum_{p=0}^{\infty} (-1)^p \frac{1}{(2p+1)!} \left(\frac{\theta}{2}\right)^{2p+1} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}) \\
 &= \cos \frac{\theta}{2} \mathbf{I} + i \sin \frac{\theta}{2} (\vec{n} \cdot \vec{\sigma}),
 \end{aligned} \tag{2.6.210}$$

waar we voor de laatste uitdrukkingen de Taylor-ontwikkelingen voor $\cos x$ en $\sin x$ herkenden. Hiermee is de uitdrukking (2.6.199) bewezen \square .

Terzijde: Quaternionen. De implementatie van rotaties volgens (2.6.199) blijkt numeriek sneller te werken dan de implementatie volgens de (3×3) -Euler representatie (2.4.179). Hierbij gebruikt men expliciet de algebra van de Pauli-matrizes, vervat in (2.6.201). De Pauli-algebra is *isomorf* aan deze van quaternionen \mathbb{H} , een niet-commutatieve uitbreiding van de complexe getallen met twee extra imaginaire getallen \mathbf{j} en \mathbf{k} , waarbij een algemeen quaternion de volgende vorm heeft:

$$h = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} \tag{2.6.211}$$

met a, b, c, d reëel, en waarbij het product van de imaginaire getallen voldoet aan¹¹:

$$\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -1 \quad \mathbf{ij} = -\mathbf{ji} = \mathbf{k} \quad \mathbf{jk} = -\mathbf{kj} = \mathbf{i} \quad \mathbf{ki} = -\mathbf{ik} = \mathbf{j}. \tag{2.6.212}$$

De isomorfe mapping

$$i\sigma_1 \rightarrow \mathbf{i} \quad i\sigma_2 \rightarrow \mathbf{j} \quad i\sigma_3 \rightarrow \mathbf{k}, \tag{2.6.213}$$

geeft dan exact dezelfde uitdrukkingen wanneer we (2.6.201) toepassen. In de literatuur over computer graphics wordt eerder gesproken over rotaties met behulp van quaternionen.

¹¹Ook te vinden op de Broom brug bij Dublin <https://en.wikipedia.org/wiki/BroomBridge>

Hoofdstuk 3

Integratie en afleiding in \mathbb{R}^n

3.1 Afleiding

3.1.1 De partieel afgeleide

Voor een functie van $n > 1$ (reële) variabelen: $f(\mathbf{x}) = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ definieren we de **partieel afgeleide** naar één van de variabelen x_i als:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} f(x_1, \dots, x_n) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{f(x_1, \dots, x_i + \epsilon, \dots, x_n) - f(x_1, \dots, x_i, \dots, x_n)}{\epsilon}. \quad (3.1.1)$$

Wanneer we de functie in kwestie enkel opvatten als een functie van deze variabele x_i is dit niets anders dan de gewone afgeleide die we kennen uit de analyse voor één variabele. We noteren deze partieel afgeleide soms ook nog kortweg als ∂_{x_i} of ∂_i . Wanneer al de partieel afgeleiden in een omgeving van een punt \mathbf{a} bestaan, en wanneer bovendien al deze afgeleiden continu zijn noemen we de functie continu differentieerbaar rond \mathbf{a} .¹ Een functie die continu differentieerbaar is in een open gebied Ω van \mathbb{R}^n noemen we ook nog een $\mathcal{C}^1(\Omega)$ functie.

Voorbeeld. Beschouw de functie $f(x, y) = \sqrt{x^2 + y}$. Bepaal hiervoor $\partial_x f(x, y)$ en $\partial_y f(x, y)$.

Oplossing:

$$\partial_x f(x, y) = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y}} \quad \partial_y f(x, y) = \frac{1}{2\sqrt{x^2 + y}}. \quad (3.1.2)$$

Hierop verder bouwend definiëren we **hogere orde partieel afgeleiden** $\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} \dots \frac{\partial}{\partial x_k} f = \partial_{x_i} \partial_{x_j} \dots \partial_{x_k} f$, voor de hand liggend als de sequentiële toepassing van de eerste orde partieel afgeleiden, bijvoorbeeld voor de tweede orde afgeleiden:

$$\partial_{x_i} \partial_{x_j} f(x_1, \dots, x_n) = \partial_{x_i} (\partial_{x_j} f(x_1, \dots, x_n)) \quad (3.1.3)$$

¹Een functie wordt continu genoemd rond \mathbf{a} , wanneer de limiet $\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{a}} f(\mathbf{x})$ bestaat en onafhankelijk is van het specifieke pad in \mathbb{R}^n waarlangs \mathbf{a} benaderd wordt.

De p -de orde afgeleide naar dezelfde variabele noteren we ook nog als

$$\frac{\partial^p}{\partial x_i^p} = \partial_{x_i}^p \quad (3.1.4)$$

Een functie noemen we p maal continu differentieerbaar in een gebied Ω wanneer al de p -de orde partieel afgeleiden bestaan en continu zijn. Bemerk dat hiervoor de functie ook $p-1$ continu differentieerbaar moet zijn. We hebben, net als bij de analyse in 1 veranderlijke dat: $\mathcal{C}^p(\Omega) \subset \mathcal{C}^{p-1}(\Omega) \subset \dots \mathcal{C}^0(\Omega)$.

Voorbeeld. Beschouw dezelfde functie $f(x, y) = \sqrt{x^2 + y}$ als hierboven. Bepaal nu de tweede orde partieel afgeleiden $\partial_x \partial_x f(x, y) = \partial_x^2 f(x, y)$, $\partial_x \partial_y f(x, y)$, $\partial_y \partial_x f(x, y)$ en $\partial_y \partial_y f(x, y) = \partial_y^2 f(x, y)$. (Het is nuttig van dergelijke afgeleiden met de hand te kunnen berekenen. ©Maple kan dit natuurlijk ook, zie het diff commando.)

Oplossing:

$$\begin{aligned} \partial_x \partial_x f(x, y) &= \frac{1}{\sqrt{x^2 + y}} - \frac{x}{(x^2 + y)^{3/2}} & \partial_x \partial_y f(x, y) &= -\frac{x}{2(x^2 + y)^{3/2}} \\ \partial_y \partial_x f(x, y) &= -\frac{x}{2(x^2 + y)^{3/2}} & \partial_y \partial_y f(x, y) &= -\frac{1}{4(x^2 + y)^{3/2}} \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

In het bovenstaande voorbeeld zien we dat $\partial_x \partial_y f = \partial_y \partial_x f$. Dit is geen toeval. Voor 2 maal continu differentieerbare functies **commuteren de partieel afgeleiden**. Dit is de stelling van Schwarz, die ook uitbreidt naar hogere orde afgeleiden: voor **p maal continu differentieerbare functies commuteren al de partieel afgeleiden t/m p-de orde**, de volgorde waarin de afgeleiden worden genomen speelt geen rol.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial}{\partial x_{i_1}} \frac{\partial}{\partial x_{i_2}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_l}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_k}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_p}} \right) f &= \left(\frac{\partial}{\partial x_{i_1}} \frac{\partial}{\partial x_{i_2}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_k}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_l}} \cdots \frac{\partial}{\partial x_{i_p}} \right) f \\ &= \frac{\partial^p f}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_p}}, \end{aligned} \quad (3.1.6)$$

waarbij de laatste compacte notatie wegens de commutatie van de partieel afgeleiden volledig ondubbelzinnig is. Mits wat combinatoriek kan je zelf nagaan dat voor voldoende differentieerbare functies van n variabelen, er $n(n+1)/2$ onafhankelijke (verschillende) tweede orde afgeleiden en $(2n+3n^2+n^3)/6$ onafhankelijke derde orde afgeleiden bestaan.

3.1.2 De kettingregel

Voor een functie $f(x)$ van één variabele kunnen we een andere functie $g(y) = f(x(y))$ definiëren, met $x(y)$ een functie van een nieuwe variabele y . De gekende kettingregel luidt in dit geval

$$\frac{dg(y)}{dy} = \frac{df(x)}{dx} \Big|_{x=x(y)} \frac{dx(y)}{dy} \quad (3.1.7)$$

wat we ook nog compacter schrijven als:

$$\frac{dg}{dy} = \frac{df}{dx} \frac{dx}{dy}, \quad \text{of in operatorvorm: } \frac{d}{dy} = \frac{dx}{dy} \frac{d}{dx} \quad (3.1.8)$$

Deze kettingregel veralgemeent naar meerdere variabelen. Nemen we n variabelen (x_1, \dots, x_n) functie van m andere variabelen (y_1, \dots, y_m) : $\mathbf{x}(\mathbf{y}) = (x_1(\mathbf{y}), \dots, x_n(\mathbf{y}))$ dan hebben we voor de partieel afgeleiden van $g(\mathbf{y}) = f(\mathbf{x}(\mathbf{y}))$:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} g(\mathbf{y}) = \sum_j \frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_j} \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(\mathbf{y})} \frac{\partial x_j}{\partial y_i}(\mathbf{y}). \quad (3.1.9)$$

Of korter:

$$\frac{\partial g}{\partial y_i} = \sum_j \left(\frac{\partial x_j}{\partial y_i} \right) \frac{\partial f}{\partial x_j} \quad \text{en in operatorvorm: } \frac{\partial}{\partial y_i} = \sum_j \left(\frac{\partial x_j}{\partial y_i} \right) \frac{\partial}{\partial x_j}, \quad (3.1.10)$$

dit is de kettingregel in haar meest gebalde vorm.

Voorbeeld. Beschouw de functie $f(x, y, z) = x + y + z$, en de nieuwe variabelen (u, v) met $(x, y, z) = (uv, u, v)$. Bereken de partieel afgeleiden van de functie $g(u, v) = f(\mathbf{x}(u, v))$ op twee manieren: 1) via de kettingregel, 2) door rechtstreekse substitutie van de nieuwe variabelen.

Oplossing: Via de kettingregel hebben we:

$$\partial_u = v\partial_x + \partial_y, \quad \partial_v = u\partial_x + \partial_z, \quad (3.1.11)$$

en dus:

$$\partial_u g = v\partial_x f + \partial_y f = v + 1, \quad \partial_v g = u\partial_x f + \partial_z f = u + 1. \quad (3.1.12)$$

Expliciete substitutie geeft $g = uv + u + v$, waaruit je onmiddellijk dezelfde partieel afgeleiden kan aflezen.

3.1.3 Coördinatentransformaties

Wanneer we voor een bepaalde open gebied Ω van \mathbb{R}^n nieuwe variabelen (y_1, \dots, y_n) kunnen definiëren, met een bijectief verband $\mathbf{x}(\mathbf{y})$ dan spreken we van een coördinatentransformatie. Inderdaad, voor elk punt bepaald door de coördinaten \mathbf{x} hebben we dan een nieuw stel coördinaten \mathbf{y} . Als elke component van $\mathbf{x}(\mathbf{y})$ bovendien differentieerbaar is dan spreekt men ook nog over een diffeomorfisme. Welnu, de kunst bij veel problemen bestaat er precies in van die coördinaten te kiezen die het probleem zo eenvoudig mogelijk maken. We komen hier zometeen ook op terug bij het stuk over integratie, maar ook later in de cursus zal bij differentiaalvergelijkingen in meerdere variabelen, het kiezen van de juiste coördinaten onontbeerlijk blijken. In de context

van differentiaalvergelijkingen, komt het er dan op aan van de partieel afgeleiden in de originele coördinaten uit te drukken in partieel afgeleiden naar de nieuwe coördinaten. Hiervoor gebruiken we dan de inverse kettingregel:

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial x_i} = \sum_j \left(\frac{\partial y_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial g}{\partial y_j}}. \quad (3.1.13)$$

Voorbeeld. (Een grotere oefening) Bij 2D golfproblemen, zoals de trilling van een drum, verschijnt de 2D Laplacian:

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (3.1.14)$$

In het geval van een cirkelvormige drum is het aangewezen van poolcoördinaten (ρ, θ) te gebruiken, bepaald door $(x, y) = (\rho \cos \theta, \rho \sin \theta)$. Druk deze 2D Laplacian uit in termen van deze polaire coördinaten.

Oplossing: Laat ons vooreerst de coördinatentransformatie inverteren. We vinden:

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \quad \theta = \arctan(y/x). \quad (3.1.15)$$

Hieruit halen we de partieel afgeleiden:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial x} &= \frac{x}{(x^2 + y^2)^{1/2}} = \cos \theta & \frac{\partial \theta}{\partial x} &= \frac{-y/x^2}{1 + (y/x)^2} = -\frac{\sin \theta}{\rho} \\ \frac{\partial \rho}{\partial y} &= \frac{y}{(x^2 + y^2)^{1/2}} = \sin \theta & \frac{\partial \theta}{\partial y} &= \frac{1/x}{1 + (y/x)^2} = \frac{\cos \theta}{\rho}. \end{aligned} \quad (3.1.16)$$

Toepassing van de kettingregel (3.1.13) levert dan:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta} \quad \frac{\partial}{\partial y} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta}, \quad (3.1.17)$$

en hieruit krijgen we dan:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x^2} &= (\cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta})(\cos \theta \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{\sin \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \theta}) \\ &= \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{\cos \theta \sin \theta}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{\cos \theta \sin \theta}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \rho \partial \theta} + \frac{\sin^2 \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \\ &\quad - \frac{\sin \theta \cos \theta}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \rho} + \frac{\sin \theta \cos \theta}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\sin^2 \theta}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

$$\begin{aligned} &= \cos^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2 \cos \theta \sin \theta}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{2 \cos \theta \sin \theta}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \rho} \\ &\quad + \frac{\sin^2 \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\sin^2 \theta}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \end{aligned} \quad (3.1.19)$$

Analoog vind je:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial y^2} &= \sin^2 \theta \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} - \frac{2 \cos \theta \sin \theta}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{2 \cos \theta \sin \theta}{\rho} \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \rho} \\ &\quad + \frac{\cos^2 \theta}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\cos^2 \theta}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \end{aligned} \quad (3.1.20)$$

Tellen we deze twee uitdrukkingen op dan daalt de rook neer en vinden we:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \quad (3.1.21)$$

of dus

$$\Delta_2 = \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (3.1.22)$$

3.1.4 De gradient en de differentiaal

De **gradientoperator** (of kortweg: gradient) definiëren we als volgt:

$$\nabla = (\partial_{x_1}, \partial_{x_2}, \dots, \partial_{x_n}) = \sum_i \mathbf{e}_i \partial_{x_i}, \quad (3.1.23)$$

met \mathbf{e}_i de cartesische basisvectoren. Inwerkend op een functie $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ geeft deze een n -componentsfunctie $\nabla f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$:

$$\nabla f(\mathbf{x}) = (\partial_{x_1} f(\mathbf{x}), \partial_{x_2} f(\mathbf{x}), \dots, \partial_{x_n} f(\mathbf{x})). \quad (3.1.24)$$

Algemeen zullen we zo'n functie op \mathbb{R}^n met n componenten een **vectorveld** noemen. Een functie met één component noemen we overigens ook nog een **scalair veld**, of kortweg veld.

Via de gradient kunnen we de variatie van een functie langs een kromme bepalen (=de **richtingsafgeleide**). Beschouw hiertoe een kromme $\mathbf{x}(t)$ in \mathbb{R}^n dan vinden we door toepassing van de kettingregel de richtingsafgeleide:

$$\frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right) \Big|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}(t)} \frac{dx_i(t)}{dt} = \nabla f \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}. \quad (3.1.25)$$

Nemen we nu verder een bepaald segment van de kromme, tussen het interval t_a en t_b , dan geeft de integraal van df/dt niets anders dan de totale variatie van f :

$$\int_{t_a}^{t_b} dt \frac{df(\mathbf{x}(t))}{dt} = \int_{t_a}^{t_b} dt \nabla f(\mathbf{x}(t)) \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} = f(\mathbf{x}(t_b)) - f(\mathbf{x}(t_a)). \quad (3.1.26)$$

Voorbeeld: Bepaal voor het veld $f(x, y) = x + y$ de gradient. Integreer vervolgens de richtingsafgeleide: $df/dt = \nabla f \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt}$ voor de kromme $(x(t), y(t)) = (x_0 t, y_0 t)$, van $t = 0$

tot $t = 1$ en toon expliciet aan dat je voor deze integraal inderdaad de uitdrukking $f(x(1), y(1)) - f(x(0), y(0)) = x_0 + y_0$ krijgt.

Oplossing: We bepalen eerst de gradient:

$$\nabla f = (1, 1). \quad (3.1.27)$$

Vervolgens de richtingsafgeleide:

$$\frac{df}{dt} = \nabla f \cdot \frac{d\mathbf{x}}{dt} = (1, 1) \cdot (x_0, y_0) = x_0 + y_0. \quad (3.1.28)$$

Tot slot vinden we voor de integraal:

$$\int_0^1 dt (df/dt) = \int_0^1 dt (x_0 + y_0) = (x_0 + y_0). \quad (3.1.29)$$

Verder is het interessant van de variatie df onafhankelijk van de parametrisatie van de kromme uit te drukken. Hiertoe schrappen we de dt factoren in beide noemers van (3.1.25) weg. Dit geeft ons een uitdrukking voor de infinitesimale variatie $f \rightarrow f + df$ van een functie $f(\mathbf{x})$, bij een bepaalde infinitesimale verplaatsing $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x} + d\mathbf{x}$:

$$df(\mathbf{x}) = \sum_i \left(\frac{\partial f(\mathbf{x})}{\partial x_i} \right) dx_i = \nabla f(\mathbf{x}) \cdot d\mathbf{x} . \quad (3.1.30)$$

De infinitesimale coördinaatvariaties dx_i noemen we **differentialen**, df noemen we ook nog de totaal differentiaal.

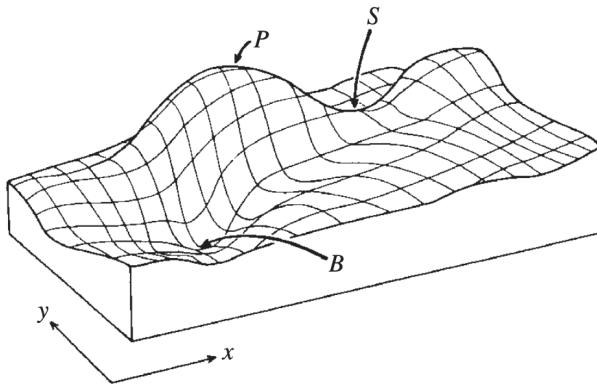
Beschouwen we nu vanaf een bepaald punt \mathbf{x} infinitesimale verplaatsingen in alle mogelijke richtingen: $d\mathbf{x} = \epsilon \mathbf{n}$, met \mathbf{n} een eenheidsvector ($\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$), dan krijgen we:

$$df(\mathbf{x}) = \epsilon \nabla f(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \epsilon \|\nabla f(\mathbf{x})\| n^\parallel , \quad (3.1.31)$$

met n^\parallel de component parallel aan de gradient. Hieruit zien we dat de variatie df maximaal (minimaal) is in de richting parallel (anti-parallel) aan de gradient. Verder is het ook duidelijk dat de variatie verdwijnt, $df = 0$, voor de richtingen orthogonaal op de gradient.

Dit verklaart het groot belang van de gradientoperator bij optimalisatie algoritmes. Voor tal van toepassingen - gaande van de training van een neuraal netwerk, het vinden van de grondtoestand van een atoomkern, tot de optimalisatie van een bepaald productieproces - is het nodig om een bepaalde kostfunctie $f(\mathbf{x})$ te minimaliseren. De gradient geeft dan de richting aan $\mathbf{n} \propto -\nabla f$ waarin een kleine stap in de ruimte van variabelen een verlaging van de kostfunctie betekent (zie het *gradient descent algoritme*).

Vanuit geometrisch oogpunt staat de gradient in het punt \mathbf{x}_0 orthogonaal (en in de richting van positieve variatie) op het $n - 1$ -dimensionele *hyperoppervlak* gedefinieerd door $f(\mathbf{x}) = c$, met $c = f(\mathbf{x}_0)$. Voor \mathbb{R}^2 gaat het hier over een kromme (=veldlijn), voor \mathbb{R}^3 is een hyperoppervlak effectief een (gekromd) oppervlak (=veldoppervlak). Denk in 2D bijvoorbeeld aan de isobaren op een weerkaart, of de hoogtelijnen op een landkaart.



Figuur 3.1: De stationaire punten voor een functie van 2 variabelen, met een minimum in B, een maximum in P en een zadelpunt in S.

Voorbeeld. Bereken de gradient en toon expliciet aan dat deze orthogonaal staat op de veldlijnen voor $f(x, y) = xy$.

Oplossing: We vinden:

$$\nabla f(x, y) = (y, x). \quad (3.1.32)$$

Verder hebben we voor de veldlijnen $xy = c$ voor een bepaalde constante c , ofwel $y = c/x$. Voor een infinitesimale verplaatsing langs een veldlijn hebben we dus $dy = -\frac{c}{x^2}dx$. De corresponderende vector $d\mathbf{x}$ leest dan:

$$d\mathbf{x} = dx(1, -c/x^2) = dx(1, -y/x) \quad (3.1.33)$$

waar we voor de laatste uitdrukking $c = xy$ invullen. Deze vector staat inderdaad orthogonaal op de gradient, $d\mathbf{x} \cdot \nabla f = 0$.

3.1.5 Taylorreeks

De Taylorreeks voor functies $f(x)$ van één variabele (1.2.4) veralgemeent naar een reeks voor functies $f(x_1, \dots, x_n)$ van meerdere variabelen:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}) &= f(\mathbf{x}_0) + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial x_i} \right) \Delta x_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_i \Delta x_j + \dots \\ &\quad + \frac{1}{k!} \sum_{i_1, \dots, i_k} \left(\frac{\partial^k f}{\partial x_{i_1} \dots \partial x_{i_k}} \right) (\Delta x_{i_1} \dots \Delta x_{i_k}) + \dots , \end{aligned} \quad (3.1.34)$$

waarbij $\Delta x_i = (x_i - x_{0i})$ en de partiële afgeleiden worden genomen in het punt \mathbf{x}_0 waarrond ontwikkeld wordt.

Voor functies die analytisch zijn rond \mathbf{x}_0 (en dat zullen we in de praktijk kunnen veronderstellen) geeft de Taylorreeks op de eerste plaats een manier om het gedrag rond \mathbf{x}_0 te bestuderen. In de eerste orde term in Δx_i (de 2de term in (3.1.34)) herkennen we $\nabla f \cdot \Delta \mathbf{x}$, waaruit we nogmaals zien hoe de gradient het gedrag voor kleine Δx_i bepaalt. In het bijzonder krijgen we een **stationair punt** (ook nog: **kritisch punt**), wanneer:

$$\nabla f = \mathbf{0}. \quad (3.1.35)$$

Voor het geval van één variabele kennen we de volgende drie situaties voor een stationair punt, $\frac{df}{dx}|_{x=x_0} = 0$:

- $\frac{d^2f}{dx^2} > 0 \rightarrow$ een minimum
- $\frac{d^2f}{dx^2} < 0 \rightarrow$ een maximum
- $\frac{d^2f}{dx^2} = 0 \rightarrow$ een stationair buigpunt

Voor meerdere variabelen is het mogelijke kwalitatieve gedrag rijker. In dat geval wordt het gedrag rond een stationair punt \mathbf{x}_0 gevatt door de **Hessiaan** H_{ij} de matrix die optreedt in de tweede orde term van (3.1.34):

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j} \right) \Delta x_i \Delta x_j = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sum_{ij} \Delta x_i H_{ij} \Delta x_j. \quad (3.1.36)$$

Deze matrix \mathbf{H} is symmetrisch, $H_{ij} = H_{ji} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}$, wegens de commutatie van de partiële afgeleiden. Uit het vorig hoofdstuk weten we dan dat die wordt gediagonaalseerd door een orthogonale transformatie $\mathbf{H} = \mathbf{O} \mathbf{D} \mathbf{O}^T$. Zo krijgen we:

$$f(\mathbf{x}) \approx f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sum_{ijl} \Delta x_i O_{il} \lambda_l O_{jl} \Delta x_j = f(\mathbf{x}_0) + \frac{1}{2} \sum_l \lambda_l \Delta x_l'^2, \quad (3.1.37)$$

met O_{ij} de orthogonale matrixcomponenten, λ_l de (reële) eigenwaarden en $\Delta x_l' = \sum_i O_{il} \Delta x_i$. Dit leidt dan tot de volgende mogelijke kwalitatieve gedragingen (zie ook fig. 3.1):

- alle λ_l 's strikt groter dan 0 \rightarrow een **minimum**.
Inderdaad, in elke richting rond x_0 stijgt de functie.
- alle λ_l 's strikt kleiner dan 0 \rightarrow een **maximum**.
In elke richting rond x_0 daalt de functie
- sommige λ_l 's strikt groter, de andere λ_l 's strikt kleiner dan 0 \rightarrow een **zadelpunt**.
In sommige richtingen daalt de functie, in andere stijgt ze.
- sommige λ_l 's gelijk aan 0. Dan krijgen we in sommige richtingen het gedrag van een stationair buigpunt, bepaald door de derde orde term in de Taylorreeks.

Bemerkt tenslotte dat uit onze analyse van het lokaal gedrag we enkel kunnen besluiten dat we in de eerste twee gevallen een lokaal minimum of maximum hebben. Voor functies die naar onder begrensd zijn, zal het kleinste lokaal minimum ook het absolute minimum zijn, voor functies die naar boven begrensd zijn zal het grootste lokaal maximum ook het absolute maximum zijn.

Voorbeeld. Bepaal de stationaire punten voor de functie $f(x, y) = x^3e^{-(x^2+y^2)}$, en onderzoek hun karakter (minimum, maximum, ...) met behulp van de Hessiaan.

Oplossing: De stationaire punten vinden we uit het verdwijnen van de partieel afgeleiden:

$$0 = \partial_x f = (3x^2 - 2x^4)e^{-(x^2+y^2)} \quad 0 = \partial_y f = -2x^3ye^{-(x^2+y^2)} \quad (3.1.38)$$

Hieruit vinden we twee stationaire punten: $(\sqrt{3/2}, 0)$ en $(-\sqrt{3/2}, 0)$, alsook een stationaire lijn: $x = 0$ (de y -as). Verder hebben we voor de 3 tweede-orde afgeleiden:

$$\begin{aligned} \partial_x^2 f &= (4x^5 - 14x^3 + 6x)e^{-(x^2+y^2)} \\ \partial_y^2 f &= x^3(4y^2 - 2)e^{-(x^2+y^2)} \\ \partial_x \partial_y f &= 2x^2y(2x^2 - 3)e^{-(x^2+y^2)} \end{aligned} \quad (3.1.39)$$

In $(\pm\sqrt{3/2}, 0)$ hebben we:

$$\partial_x^2 f = \mp 6\sqrt{3/2}e^{-3/2} \quad \partial_y^2 f = \mp 3\sqrt{3/2}e^{-3/2} \quad \partial_x \partial_y f = 0. \quad (3.1.40)$$

De Hessiaan is reeds diagonaal. Voor $(\sqrt{3/2}, 0)$ zijn beide eigenwaarden negatief, hier hebben we een maximum. Voor $(-\sqrt{3/2}, 0)$ zijn beide eigenwaarden positief, hier hebben we een minimum. De functie $f(x, y)$ is duidelijk zowel naar boven als naar onder begrensd, we hebben hier dus te maken met een absoluut minimum en maximum.

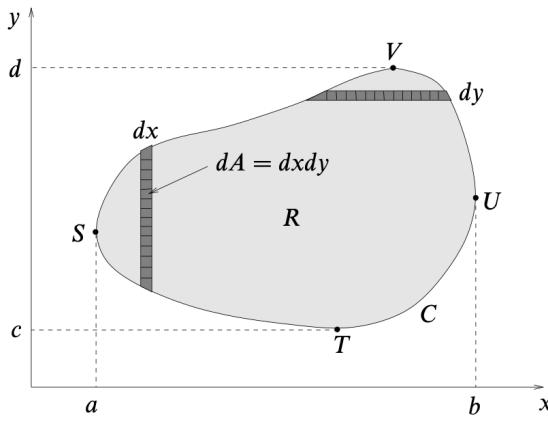
Op de y -as zijn al de tweede afgeleiden gelijk aan nul. De Hessiaan is dus gelijk aan de nulmatrix, we zitten met het vierde geval van hierboven, we krijgen een lijn van stationaire buigpunten.

3.2 Integratie

3.2.1 De Riemanniaanse integraal

We herinneren ons dat de integraal van een functie $f(x)$ van één variabele wordt gedefinieerd als de limiet van een som over segmenten Δ_p , waarbij de limiet wordt genomen naar infinitesimale segmenten $\Delta_p \rightarrow dx$:

$$\int dx f(x) = \lim_{\Delta_p \rightarrow 0} \sum_p \Delta_p f(x_p). \quad (3.2.41)$$



Figuur 3.2: Een gebied R in het (x, y) -vlak, begrensd door de kromme C , waarover we een functie $f(x, y)$ willen integreren.

Dit is de Riemanniaanse definitie van de integraal en deze veralgemeend onmiddellijk naar meervoudige integralen over algemene regio's R in \mathbb{R}^n :

$$\int_R dx_1 dx_2 \dots dx_n f(\mathbf{x}) = \lim_{\Delta V_p \rightarrow 0} \sum_p \Delta V_p f(\mathbf{x}_p). \quad (3.2.42)$$

In plaats van een sommatie over infinitesimale lengtes $\Delta_i \rightarrow dx$ krijgen we nu dus een sommatie over infinitesimale volumes horende bij de punten \mathbf{x}_p in R :

$$\Delta V_p = \Delta_{x_1 p} \Delta_{x_2 p} \dots \Delta_{x_n p} \rightarrow dx_1 dx_2 \dots dx_n. \quad (3.2.43)$$

Een functie wordt Riemann integreerbaar genoemd als deze limiet bestaat. We gaan hier niet dieper in op de verdere eigenschappen van dergelijke functies, we geven wel nog mee dat integreerbaarheid een zwakkere voorwaarde is dan continuïteit: continue functies zijn altijd integreerbaar en zelfs sommige singuliere functies hebben een goed gedefinieerde integraal (bvb. in 1D is $f(x) = 1/\sqrt{x}$ integreerbaar rond $x = 0$).

Qua notatie zullen we zo'n volumeintegraal soms ook nog schrijven als

$$\begin{aligned} \int dx_1 dx_2 \dots dx_n f(\mathbf{x}) &= \int d^n x f(\mathbf{x}) \\ &= \int dV f(\mathbf{x}) \\ &= \int dx_1 \int dx_2 \dots \int dx_n f(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.2.44)$$

waarbij de laatste uitdrukking al duidelijk maakt dat dergelijke meervoudige integraal zich uiteindelijk zal herleiden tot opeenvolgende enkelvoudige integralen.

Laat ons dit wat concreter maken voor **oppervlakte-integralen** van functies $f(x, y)$ in 2 variabelen. De Riemanniaanse definitie (3.2.42) leest dan:

$$\int_R dx dy f(x, y) = \lim_{\Delta A_p \rightarrow 0} \sum_p \Delta A_p f(x_p, y_p), \quad (3.2.45)$$

waarbij we nu infinitesimale rechthoekige oppervlakjes krijgen:

$$\Delta A_p = \Delta_{x_p} \Delta_{y_p} \rightarrow dx dy = dA. \quad (3.2.46)$$

Kijken we naar figuur 3.2, dan zien we twee mogelijkheden om de integraal over het gebied R uit te voeren. We kunnen enerzijds eerst de som over de infinitesimale oppervlakken ΔA_p in de horizontale richting uitvoeren. Dit geeft voor elke y een integraal over x met de ondergrens bepaald door de kromme VST en de bovengrens bepaald door de kromme VUT . De volledige oppervlakte integraal krijgen we dan door dit resultaat voor elke y te integreren van $y = c$ tot $y = d$. Zo krijgen we:

$$\int_R dA f(x, y) = \int_c^d dy \int_{x_1(y)}^{x_2(y)} dx f(x, y) \quad (3.2.47)$$

met $x_2(y)$ de parametervergelijking van kromme VUT en $x_1(y)$ de vergelijking voor VST .

Even goed kunnen we eerst sommeren (en dus integreren) in de verticale richting, met de bovengrens (ondergrens) van y bepaalt door de kromme SVU (STU) waarna we voor elke x het resultaat in de horizontale richting integreren van a tot b :

$$\int_R dA f(x, y) = \int_a^b dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy f(x, y) \quad (3.2.48)$$

met $y_2(x)$ ($y_1(x)$) de parametervergelijking van kromme SVU (STU).

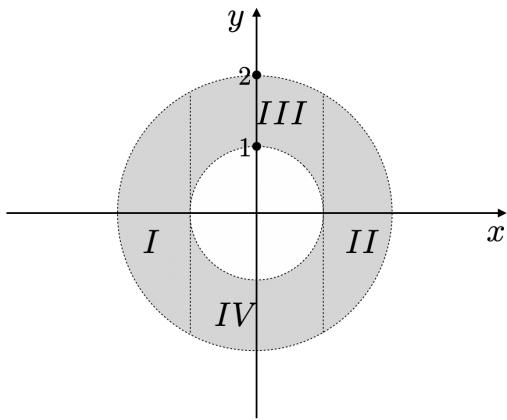
In dit voorbeeld snijden horizontale rechten de rand C slechts twee keer, zodat we twee parametervergelijkingen krijgen $\{x_1(y), x_2(y)\}$ voor de onder- en bovengrens bij de x -integratie. Deze eigenschap maakt het gebied R **Y -projecteerbaar**. Even goed snijden de verticale rechten de rand C slechts twee keer, zodat we opnieuw twee parametervergelijkingen krijgen $\{y_1(x), y_2(x)\}$ voor de onder- en bovengrens bij de y -integratie. Hier spreekt met dan over **X -projecteerbaarheid**. Niet elk gebied zal X - of Y -projecteerbaar zijn. Maar over het algemeen zullen we een gebied R wel kunnen opsplitsen in deelgebieden R_1, R_2, \dots die X - of Y -projecteerbaar zijn, waarvoor dus elke integraal over een deelgebied zich tot het geval van de figuur herleidt met de boven- en ondergrens (in de X of Y richting) beschreven door een parametervergelijking. Het tweede voorbeeld hieronder geeft daar een illustratie van.

Voorbeeld: Bereken de oppervlakteintegraal

$$I = \int_R dx dy x^2 y, \quad (3.2.49)$$

waarbij R de driehoek is begrensd door de rechten $x = 0, y = 0$ en $x + y = 1$. Doe dit voor beide integratievolgordes (eerst over x dan over y en vice versa) en verifieer daardoor explicet dat $\int dx \int dy f(x, y) = \int dy \int dx f(x, y)$.

Integreren we eerst over x en dan over y , dan krijgen we volgende uitdrukking (om de integratiegrenzen te bepalen is het handig van een tekening te maken):



Figuur 3.3: De 2D ring in het (x, y) vlak, met de vier afzonderlijke gebieden waar we de oppervlakteintegraal telkens als $\int dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy$ kunnen berekenen.

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^1 dy \int_0^{1-y} dx x^2 y \\
 &= \int_0^1 dy \frac{(1-y)^3}{3} y \\
 &= \frac{1}{60}
 \end{aligned} \tag{3.2.50}$$

Voor de andere integratievolgorde krijgen we:

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^1 dx \int_0^{1-x} dy x^2 y \\
 &= \int_0^1 dx x^2 \frac{(1-x)^2}{2} \\
 &= \frac{1}{60}
 \end{aligned} \tag{3.2.51}$$

We krijgen dus inderdaad hetzelfde resultaat voor beide integratievolgordes.

Voorbeeld. Bereken het oppervlak $\int_R dA$ van de 2D ring in fig. 3.3, begrensd aan de buitenkant door de cirkel met straal $r = 2$, en aan de binnenkant begrensd door de cirkel met straal $r = 1$.

Oplossing: De buitenrand van het gebied wordt gegeven door de vergelijking $x^2 + y^2 = 4$, voor de binnenste rand hebben we $x^2 + y^2 = 1$. Om deze oppervlakteintegraal uit te

rekenen verdelen we het gebied R in de vier regio's aangegeven in figuur 3.3. Het gebied I in de figuur wordt dan gegeven door de voorwaarden:

$$-2 < x < -1 \quad \text{en} \quad -\sqrt{4-x^2} < y < \sqrt{4-x^2}. \quad (3.2.52)$$

Dit geeft de integraal:

$$\int_I dA = \int_{-2}^{-1} dx \int_{-\sqrt{4-x^2}}^{\sqrt{4-x^2}} dy = \int_{-2}^{-1} dx 2\sqrt{4-x^2} = -\sqrt{3} + \frac{4\pi}{3}, \quad (3.2.53)$$

waarbij het laatste resultaat ons gegeven wordt door \textcircled{C} Maple. Voor het gebied II vinden we uiteraard hetzelfde resultaat, expliciet:

$$\int_{II} dA = \int_2^1 dx \int_{-\sqrt{4-x^2}}^{\sqrt{4-x^2}} dy = \int_{-2}^{-1} dx 2\sqrt{4-x^2} = -\sqrt{3} + \frac{4\pi}{3}. \quad (3.2.54)$$

Het gebied III wordt dan bepaald door de voorwaarden:

$$-1 < x < 1 \quad \text{en} \quad \sqrt{1-x^2} < y < \sqrt{4-x^2}, \quad (3.2.55)$$

met dan als integraal:

$$\int_{III} dA = \int_{-1}^1 dx \int_{\sqrt{1-x^2}}^{\sqrt{4-x^2}} dy = \int_{-1}^1 dx \sqrt{4-x^2} - \sqrt{1-x^2} = \sqrt{3} + \frac{\pi}{6}. \quad (3.2.56)$$

Voor de integraal in het gebied IV vinden we dan opnieuw hetzelfde resultaat. De totale integraal leest dan:

$$\int_R dA = \int_I dA + \int_{II} dA + \int_{III} dA + \int_{IV} dA = 3\pi. \quad (3.2.57)$$

Uit de oppervlakteformule van de cirkel $A = \pi r^2$ wisten we natuurlijk al dat we $\pi(4-1) = 3\pi$ moesten krijgen. Oef, de integralen doen wat ze moeten doen.

Gaan we nu over naar de **de volume-integraal** van een functie $f(x, y, z)$ van drie variabelen, dan hebben we:

$$\int_R dxdydz f(x, y, z) = \lim_{\Delta V_p \rightarrow 0} \sum_p \Delta V_p f(x_p, y_p, z_p). \quad (3.2.58)$$

De uitwerking van dergelijke volume-integraal is volledig analoog als bij de oppervlakte-integraal, met als enig verschil dat er nu sequentieel over drie in plaats van twee variabelen moet geïntegreerd worden. We geven onmiddellijk een voorbeeld.

Voorbeeld, volume-integraal. Bepaal de massa M van de tetrahedron R , begrenst door de coördinaatvlakken $x = 0$, $y = 0$, $z = 0$ en door het vlak $x/a + y/b + z/c = 1$, waarbij de dichtheid gegeven wordt door $\rho(x, y, z) = \rho_0(1 + x/a)$.

Oplossing: Om de massa te bepalen integreren we dichtheid over het volume:

$$\begin{aligned}
 M &= \int_R dV \rho(x, y, z) \\
 &= \rho_0 \int_0^a dx \left(1 + \frac{x}{a}\right) \int_0^{b(1-x/a)} dy \int_0^{c(1-x/a-y/b)} dz, \\
 &= \rho_0 \int_0^a dx \left(1 + \frac{x}{a}\right) \int_0^{b(1-x/a)} dy c \left(1 - \frac{x}{a} - \frac{y}{b}\right) \\
 &= \rho_0 \int_0^a dx \left(1 + \frac{x}{a}\right) \left(\frac{bc}{2} - \frac{bcx}{a} + \frac{bcx^2}{2a^2}\right) \\
 &= \rho_0 \frac{5abc}{24}.
 \end{aligned} \tag{3.2.59}$$

(Het is opnieuw handig om een figuur te maken van het integratiegebied om de grenzen te bepalen.)

We overlopen hier tot slot van deze subsectie nog enkele **typische toepassingen** van oppervlakte of volume-integralen voornamelijk in de context van de mechanica van starre lichamen:

- Berekening oppervlakte of volume

$$A = \int_R dxdy \quad V = \int_R dxdydz \tag{3.2.60}$$

- Berekening massa door de integratie van de oppervlakte- of volume dichtheid:

$$M = \int_R dxdy \rho(x, y) \quad M = \int_R dxdydz \rho(x, y, z) \tag{3.2.61}$$

- Berekening massmiddelpunt \mathbf{x}_{mm} :

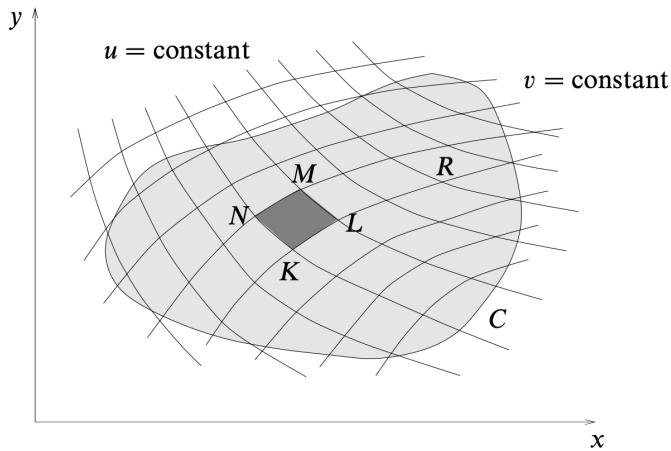
$$\begin{aligned}
 (x_{mm}, y_{mm}) &= \frac{1}{M} \int_R dxdy \rho(x, y) (x, y) \\
 (x_{mm}, y_{mm}, z_{mm}) &= \frac{1}{M} \int_R dxdydz \rho(x, y, z) (x, y, z).
 \end{aligned} \tag{3.2.62}$$

(De totale impuls van een star lichaam is dan $M\dot{\mathbf{x}}_{mm} = M\mathbf{v}_{mm}$.)

- Berekening inertiaal moment tensor I_{ij} (met $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$):

$$I_{ij} = \int_R dxdy \rho(x, y) x_i x_j \quad I_{ij} = \int_R dxdydz \rho(x, y, z) x_i x_j \tag{3.2.63}$$

(Voor het draaimoment \vec{L} van een star lichaam dat roteert rond de oorsprong, rond een draaias met eenheidsvector \vec{n} en met hoeksnelheid ω hebben we dan $L_i = \omega \sum_j I_{ij} n_j$. Gegeven een krachtmoment (*torque*) m in de richting van \mathbf{n} , hebben we verder $m = \dot{\omega}(\sum_{ij} n_i n_j I_{ij})$)



Figuur 3.4: Het parallellogram $MNKL$ bepaald door kleine (uiteindelijk infinitesimale) variaties van de kromlijnige coördinaten (u, v) .

3.2.2 Verandering integratievariabelen

Tot nu toe bepaalden we onze integralen in termen van de variabelen (x_1, x_2, \dots, x_n) die we als cartesische coördinaten opvatten. Afhankelijk van de vorm van het gebied waarover geïntegreerd wordt en van de functie zal een integraal merkelijk makkelijker worden door over te gaan op een geschikt stel nieuwe coördinaten (u_1, \dots, u_n) .

In het 1D geval weten we reeds uit een vorige cursus hoe we dergelijke verandering van integratievariabelen moeten aanpakken. Voor een algemene nieuwe variabele u , die via een inverteerbare en afleidbare afbeelding $u(x)$ gerelateerd is aan de oude variabele x over het integraleinterval $[x_1, x_2]$, schrijven we via de kettingregel $dx = \frac{dx}{du} du$:

$$\int_{x_1}^{x_2} dx f(x) = \int_{u(x_1)}^{u(x_2)} du \frac{dx(u)}{du} f(x(u)) = \int_{u(x_1)}^{u(x_2)} du \frac{dx}{du} g(u) = \int_{u_1}^{u_2} du \left| \frac{dx}{du} \right| g(u). \quad (3.2.64)$$

Hierbij schrijven we indien $dx/du > 0$, $u_1 = u(x_1) < u(x_2) = u_2$ en indien $dx/du < 0$, $u_1 = u(x_2) < u(x_1) = u_2$. In het laatste geval gebruiken we dat $\int_{u_2}^{u_1} du(\dots) = - \int_{u_1}^{u_2} du(\dots)$.

Om te begrijpen hoe deze verandering van integratie-variabelen veralgemeent naar hogere dimensies merken we eerst op dat $dV = dx_1 dx_2 \dots dx_n$ inderdaad de juiste uitdrukking geeft voor het infinitesimale Euclidische ² volume-element (= oppervlakte van infinitesmale rechthoek voor $n = 2$, volume van de infinitesimale balk voor $n = 3$) in cartesische coördinaten. De vraag die zich dan stelt is wat de uitdrukking wordt van het infinitesimale volume-element in termen van algemene nieuwe niet-cartesische coördinaten. Om deze vraag te beantwoorden bekijken we de infinitesimale vectoren

²Hiermee bedoelen we het volume dat volgt uit de Euclidische meetkunde, bepaald door de standaard norm $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2}$ in cartesische coördinaten.

$d\mathbf{x}_{u_i}$ geassocieerd aan de coördinaatvariatie du_i . Via de kettingregel vinden we:

$$d\mathbf{x}_{u_i} = \left(\frac{\partial x_1}{\partial u_i}, \frac{\partial x_2}{\partial u_i}, \dots, \frac{\partial x_n}{\partial u_i} \right) du_i. \quad (3.2.65)$$

Voor algemene coördinaten u_i zullen deze vectoren niet orthogonaal zijn. In 2D, bijvoorbeeld, bepalen ze in het algemeen een parallellogram in plaats van een rechthoek (zie figuur 3.4). Uit het vorige hoofdstuk weten we hoe we uit de determinant van de matrix opgebouwd uit n vectoren (in cartesische componenten) het corresponderend Euclidisch volume krijgen (zie (2.3.96)). Zo vinden we dus algemeen:

$$dV = |\det([d\mathbf{x}_{u_1} \ d\mathbf{x}_{u_2} \ \dots \ d\mathbf{x}_{u_n}])| = |\det(J)du_1du_2\dots du_n| = |\det(J)|du_1du_2\dots du_n$$

met $J_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial u_j}$.

wat we finaal nog kunnen herschrijven als:

$$dx_1dx_2\dots dx_n = du_1du_2\dots du_n |\det(\frac{\partial x_i}{\partial u_j})|. \quad (3.2.66)$$

De matrix $J_{ij} = \frac{\partial x_i}{\partial u_j}$ wordt de **Jacobiaan** genoemd, met $\det(J)$ dan de **Jacobiaanse determinant**. Bemerkt dat we in deze uitdrukking reeds de integraalgrenzen van klein naar groot nemen, $u_{i1} < u_{i2}$, zodat $du_i > 0$, zoals in de laatste gelijkheid voor het 1D geval (3.2.64).

Voorbeeld. In het voorbeeld in §3.1.3 berekenden we de 2D-Laplaciaan in poolcoördinaten, gegeven door $(x, y) = (\rho \cos \theta, \rho \sin \theta)$. Bereken nu de Jacobiaanse determinant voor deze coördinatentransformatie. Gebruik dit vervolgens om de oppervlakte van de ring in fig. 3.3 opnieuw te berekenen, deze keer door te integreren over de poolcoördinaten (ρ, θ) .

Oplossing: Voor de Jacobiaanse determinant vinden we:

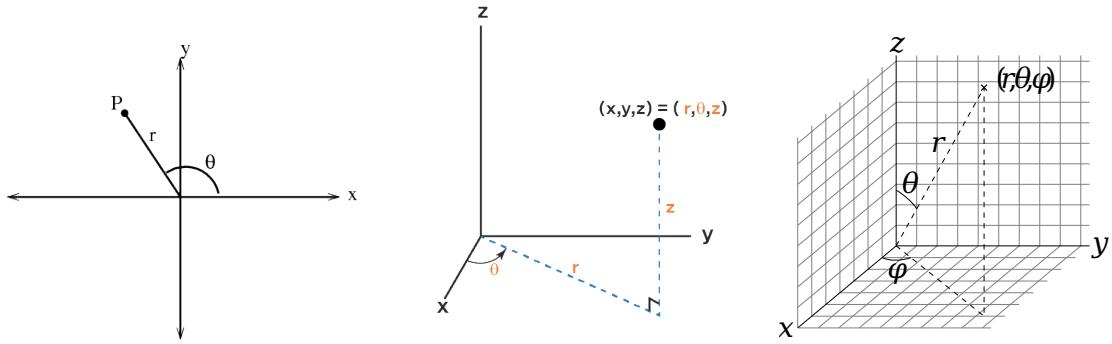
$$\begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial \rho} & \frac{\partial x}{\partial \theta} \\ \frac{\partial y}{\partial \rho} & \frac{\partial y}{\partial \theta} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \theta & -\rho \sin \theta \\ \sin \theta & \rho \cos \theta \end{vmatrix} = \rho(\cos \theta^2 + \sin \theta^2) = \rho. \quad (3.2.67)$$

Voor de oppervlakte-integraal over de ring gebruiken we dan $dA = \rho d\rho d\theta$. De integratiegrenzen zijn eenvoudig: $1 < \rho < 2$ en $0 < \theta < 2\pi$ en dus:

$$\int_R dA = \int_1^2 d\rho \rho \int_0^{2\pi} d\theta = \frac{2^2 - 1^2}{2} 2\pi = 3\pi. \quad (3.2.68)$$

3.2.3 Pool-, cilinder- en bolcoördinaten

Hier geven we tot slot de relevante uitdrukkingen voor drie veelgebruikte coördinaatsystemen, geïllustreerd in fig. 3.5 (reken zelf de Jacobiaanse determinanten na).



Figuur 3.5: (a): Poolcoördinaten. (b) Cilindercoördinaten. (c): Bolcoördinaten.

- **Poolcoördinaten**

$$(x, y) = (r \cos \theta, r \sin \theta) \quad dA = r dr d\theta \quad (3.2.69)$$

Het coördinaatgebied $\{0 < r < \infty, 0 \leq \theta < 2\pi\}$ beschrijft heel de Euclidische 2D ruimte op de oorsprong $(x, y) = (0, 0)$ na, waarvoor θ onbepaald is. Voor de radiële coördinaat r hebben we $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ (= afstand tot de oorsprong). Soms wordt ook nog ρ i.p.v. r gebruikt.

- **Cilindercoördinaten**

$$(x, y, z) = (r \cos \theta, r \sin \theta, z) \quad dV = r dr d\theta dz \quad (3.2.70)$$

Het coördinaatgebied $\{0 < r < \infty, 0 \leq \theta < 2\pi, -\infty < z < +\infty\}$ beschrijft heel de Euclidische 3D ruimte op de z -as na, $(x, y, z) = (0, 0, z)$, waarvoor θ onbepaald is. Voor de radiële coördinaat r hebben we opnieuw $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ (= afstand tot de z -as). Soms wordt ook nog ρ i.p.v. r gebruikt.

- **Bolcoördinaten**

$$(x, y, z) = (r \sin \theta \cos \varphi, r \sin \theta \sin \varphi, r \cos \theta) \quad dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \quad (3.2.71)$$

Het coördinaatgebied $\{0 < r < \infty, 0 < \theta < \pi, 0 \leq \varphi < 2\pi\}$ beschrijft heel de Euclidische 3D ruimte op de z -as na, $(x, y, z) = (0, 0, z)$, waarvoor φ onbepaald is. Nu hebben we voor de radiële coördinaat r dat $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ (=afstand tot de oorsprong).

Voorbeeld. Bereken het volume van een kegel, begrensd door het kegeloppervlak, $x^2 + y^2 = z^2$ met $z > 0$, en door het coördinaatvlak $z = 2$. Doe dit op twee manieren: 1- door te integreren in polaire coördinaten 2- door te integreren in bolcoördinaten.

Oplossing: Laat ons de integraal eerst in polaire coördinaten uitwerken. In deze coördinaten vinden we voor het integratiegebied (maak zelf een figuur om dit te verifiëren):

$$R = \{0 < z < 2, 0 < \varphi < 2\pi, 0 < r < z\}, \quad (3.2.72)$$

en de integraal wordt dan:

$$\begin{aligned} V_R &= \int_R r dr dz d\varphi \\ &= \int_0^2 dz \int_0^z dr r \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 2\pi \int_0^2 dz \frac{z^2}{2} \\ &= \frac{8\pi}{3} \end{aligned} \quad (3.2.73)$$

In bolcoördinaten vinden we voor het integratiegebied:

$$R = \{0 < \theta < \pi/4, 0 < \varphi < 2\pi, 0 < r < \frac{2}{\cos \theta}\}, \quad (3.2.74)$$

wat leidt tot de integraal:

$$\begin{aligned} V_R &= \int_R r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \\ &= \int_0^{\pi/4} d\theta \sin \theta \int_0^{2/\cos \theta} r^2 dr \int_0^{2\pi} d\varphi \\ &= 2\pi \int_0^{\pi/4} d\theta \sin \theta \frac{(\frac{2}{\cos \theta})^3}{3} \\ &= \frac{8\pi}{3} \end{aligned} \quad (3.2.75)$$

Hoofdstuk 4

Vectoranalyse in drie dimensies

4.1 Vectoren en vectorbewerkingen

In dit hoofdstuk bewegen we ons exclusief in de Euclidische 3D ruimte (met soms ook nog even een excursie naar 2D). In heel goede benadering is dat de ruimte waarin onze fysieke wereld zich bevindt en het spreekt dan ook vanzelf dat de analyse in deze ruimte een apart hoofdstuk verdient. Laat ons om het beginnen terugkeren naar het begin van hoofdstuk 2, waar we als eerste voorbeeld vectoren introduceerden als **plaatsvectoren**, met bijvoorbeeld de plaatsvector geassocieerd aan het punt P t.o.v het punt Q gegeven door: $\overrightarrow{QP} = (p_1 - q_1, p_2 - q_2, p_3 - q_3)$. Typisch nemen we bij het opschrijven van plaatsvectoren, de oorsprong O met cartesische coördinaten $(0, 0, 0)$ als eerste aangrijppingspunt, voor de plaatsvector schrijven we dan $\overrightarrow{OP} = (p_1, p_2, p_3)$. Andere notaties voor plaatsvectoren die we hier meer hanteren zijn $\vec{x} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$ of $\vec{r} = (x, y, z) = (x_1, x_2, x_3)$.

Plaatsvectoren zijn belangrijk, maar ze zijn zeker niet de enige relevante vectoren. Zo hebben we bijvoorbeeld de snelheidsvector van een deeltje $\vec{v} = (v_x, v_y, v_z)$ die we vinden als $\frac{d\vec{r}}{dt}$ voor de baan $\vec{r}(t)$. Of ook bijvoorbeeld het elektrisch veld in een bepaald punt, wat een grootte en een richting heeft (dus een vector is): $\vec{E} = (E_x, E_y, E_z)$. De drie getallen E_x, E_y, E_z geven de componenten van een vector t.o.v. een stel **cartesische basisvectoren**. Aldus kunnen we ook nog schrijven:

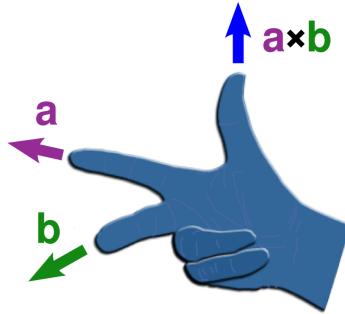
$$\vec{E} = E_x \vec{e}_x + E_y \vec{e}_y + E_z \vec{e}_z = E_1 \vec{e}_1 + E_2 \vec{e}_2 + E_3 \vec{e}_3 = \sum_{i=1}^3 E_i \vec{e}_i. \quad (4.1.1)$$

4.1.1 Scalair product, norm en afstand

Een belangrijk vectorbewerking is het Euclidisch **scalair product** (ook nog **inproduct** genoemd):¹

$$\vec{v} \cdot \vec{w} = v_1 w_1 + v_2 w_2 + v_3 w_3 = \sum_i v_i w_i, \quad (4.1.2)$$

¹Dat we reeds ontmoetten in hoofdstuk 2.



Figuur 4.1: De rechterhandregel voor het vectorproduct. Als dusdanig vormt $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{a} \times \mathbf{b}\}$ een basis, die men een **rechtshandige basis** noemt.

met als belangrijke eigenschap de **commutativiteit**:

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \vec{v} \cdot \vec{u}. \quad (4.1.3)$$

Het scalair product heeft ook een welbepaalde meetkundige betekenis:

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = ||\vec{u}|| ||\vec{v}|| \cos \theta, \quad (4.1.4)$$

met θ de hoek tussen de twee vectoren en de **norm** gedefinieerd als:

$$||\vec{u}|| = \sqrt{\vec{u} \cdot \vec{u}}. \quad (4.1.5)$$

Deze norm laat ons ook nog toe van een algemene vector te schrijven als:

$$\vec{u} = ||\vec{u}|| \vec{n}, \quad (4.1.6)$$

waarbij $||\vec{u}||$ de grootte geeft en $\vec{n} = \vec{u} / ||\vec{u}||$ de eenheidsvector ($||\vec{n}|| = 1$) is die de richting bepaald.

Wanneer we te maken hebben met plaatsvectoren, dan geeft

$$||\vec{r}|| = r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad (4.1.7)$$

ook precies **de afstand** van het betreffende punt P tot de oorsprong O . Algemeen geeft $||\vec{r} - \vec{r}'||$ de afstand tussen de punten P en P' .

4.1.2 Vectorieel product

In drie dimensies kan men ook het zogenaamde vectorieel product (ook nog: vectorproduct) invoeren. Hierbij geeft het product van twee vectoren (in tegenstelling tot het scalair product) opnieuw een vector. Vanuit meetkundig oogpunt wordt dit vectorproduct van twee vectoren \vec{u} en \vec{v} , gedefinieerd als de vector $\vec{w} = \vec{u} \times \vec{v}$ die:

1. orthogonaal staat op het vlak opgespannen door \vec{u} en \vec{v} :

$$\vec{u} \cdot \vec{w} = \vec{v} \cdot \vec{w} = 0 \quad (4.1.8)$$

2. met als norm de grootte van het parallellogram bepaald door \vec{u} en \vec{v} :

$$\|\vec{w}\| = \|\vec{u}\| \|\vec{v}\| \sin \theta, \quad (4.1.9)$$

met θ de hoek tussen \vec{u} en \vec{v} .

3. wijzend in de richting bepaald door de rechterhandregel (zie fig. 4.1).

Bemerk dat dus: $\vec{u} \times \vec{v} = -\vec{v} \times \vec{u}$ en dat $\vec{u} \times \vec{v} = \vec{0}$ wanneer \vec{u} en \vec{v} parallel zijn. Verder is het ook handig van het vectorproduct expliciet uit te drukken t.o.v. een (rechtshandige) cartesische basis $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ met volgende symbolische determinant-notatie (die je zelf mits wat rekenwerk kan aantonen):

$$\vec{u} \times \vec{v} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \end{vmatrix}, \quad (4.1.10)$$

waarbij we de componenten van $\vec{u} \times \vec{v}$ vinden door de determinant te ontwikkelen naar de eerste rij: $\vec{u} \times \vec{v} = \sum_i \vec{e}_i C_{1i}$. In index-notatie wordt dit voor de componenten:

$$(\vec{u} \times \vec{v})_i = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} u_j v_k, \quad (4.1.11)$$

met ϵ_{ijk} het Levi-Civita symbool (zie verg. (2.3.85)), of explicet:

$$\begin{aligned} (\vec{u} \times \vec{v})_1 &= u_2 v_3 - u_3 v_2 \\ (\vec{u} \times \vec{v})_2 &= u_3 v_1 - u_1 v_3 \\ (\vec{u} \times \vec{v})_3 &= u_1 v_2 - u_2 v_1 \end{aligned} \quad (4.1.12)$$

Het gemengd product van drie vectoren $\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ wordt verder nog gedefinieerd als:

$$\vec{u} \cdot (\vec{v} \times \vec{w}) = \begin{vmatrix} u_1 & u_2 & u_3 \\ v_1 & v_2 & v_3 \\ w_1 & w_2 & w_3 \end{vmatrix}, \quad (4.1.13)$$

waarbij het rechterlid onmiddellijk volgt uit de determinant-uitdrukking (4.1.10). Bemerk dat:

$$\vec{u} \cdot (\vec{v} \times \vec{w}) = \vec{w} \cdot (\vec{u} \times \vec{v}) = \vec{v} \cdot (\vec{w} \times \vec{u}). \quad (4.1.14)$$

Tot slot vermelden we nog drie identiteiten:

- **Triple product:**

$$\vec{u} \times (\vec{v} \times \vec{w}) = (\vec{u} \cdot \vec{w}) \vec{v} - (\vec{u} \cdot \vec{v}) \vec{w}, \quad (4.1.15)$$

hieruit zien we ook explicet dat het vectorproduct **niet-associatief** is:

$$\vec{u} \times (\vec{v} \times \vec{w}) \neq (\vec{u} \times \vec{v}) \times \vec{w} \quad (4.1.16)$$

- **Jacobi:**

$$\vec{u} \times (\vec{v} \times \vec{w}) + \vec{w} \times (\vec{u} \times \vec{v}) + \vec{v} \times (\vec{w} \times \vec{u}) = \vec{0} \quad (4.1.17)$$

- **Lagrange:**

$$\|\vec{v} \times \vec{w}\|^2 = \|\vec{v}\|^2 \|\vec{w}\|^2 - (\vec{v} \cdot \vec{w})^2. \quad (4.1.18)$$

4.2 (Vector)velden en vectoriële afleiding

4.2.1 Vector- en scalaire velden: Maxwell en Navier-Stokes

Vectorvelden, scalaire velden en de verschillende afleidingsoperatoren vormen het cruciale ingredient bij de beschrijving van tal van fenomenen. We geven hier twee voorbeelden.

De wetten van Maxwell. Deze vormen de backbone van het elektromagnetisme. We geven de vier wetten zoals ze gelden in vacuüm:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (4.2.19)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \quad (4.2.20)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0} \quad (4.2.21)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} - \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \mu_0 \vec{j} \quad (4.2.22)$$

Hier zijn ϵ_0 and μ_0 respectievelijk de elektrische en magnetische veldconstante. $\vec{E}(x, y, z, t)$ is het elektrische veld op tijdstip t en positie $\vec{x} = (x, y, z)$. Dit is, zoals reeds vermeld in het begin van § 4.1 (op elk tijdstip) een **vectorveld**: op elke positie heeft het drie componenten, die samen zowel de grootte als richting bepalen. Andere vectorvelden hier zijn het magnetisch veld $\vec{B}(x, y, z, t)$ en de (ladings)stroomdichtheid $\vec{j}(x, y, z, t)$. Verder verschijnt er in deze vergelijking ook nog het **scalaire veld** $\rho(x, y, z, t)$, wat op elke positie en tijdstip de ladingsdichtheid geeft. **Vectorvelden hebben dus drie componenten, scalaire velden slechts één component.** Verder slaat $\frac{\partial}{\partial t}$ hier op de partiële afgeleide naar de tijd. De ruimtelijke afgeleiden bespreken we zometeen.

De Navier-Stokes vergelijkingen. Deze liggen aan de basis van de beschrijving van het dynamisch gedrag van vloeistoffen en gassen. We schrijven zowel de **continuiteitsvergelijking** (zonder afvoer- of bronterm):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0, \quad (4.2.23)$$

als de eigenlijke Navier-Stokes momentum vergelijking (voor het geval van constante dynamische viscositeit μ en verdwijnende tweede viscositeitscoëfficiënt):

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v} \right) = -\vec{\nabla} p + \mu \left(\vec{\nabla}^2 \vec{v} + \frac{1}{3} \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) \right) + \rho \vec{g}. \quad (4.2.24)$$

De twee vectorvelden hier zijn: $\vec{v}(x, y, z, t)$, die de snelheid beschrijft van het vloeistof/gas-elementje op de betreffende positie en tijd, en $\vec{g}(x, y, z)$, het zwaartkracht-

vectorveld. Verder hebben we als scalaire velden nu de massadichtheid $\rho(x, y, z, t)$ en druk $p(x, y, z, t)$.

4.2.2 The Fab Four: gradiënt, divergentie vectorveld, Laplaciaan, rotor

De **gradiënt-operator**² (ook nog: nabla-operator) $\vec{\nabla}$ introduceerden we reeds in § 3.1.4:

$$\boxed{\vec{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = \sum_i \vec{e}_i \frac{\partial}{\partial x_i}}. \quad (4.2.25)$$

Om de betekenis van uitdrukkingen waarin deze gradiënt voorkomt te achterhalen dient zowel rekening gehouden te worden met de werking van de afgeleiden $\frac{\partial}{\partial x_i}$ als met het vectoriel karakter. Voor de werking van de afgeleiden geldt de standaard-conventie dat deze in een uitdrukking inwerken op alles wat er rechts van staat, wat betreft het vectoriel karakter hanteren we dezelfde conventies als bij gewone vectoren.

Zo vinden we bijvoorbeeld voor de eerste term in het rechterlid van Navier-Stokes (4.2.24) **de gradiënt van een scalair veld**:

$$\boxed{\vec{\nabla} p = \left(\frac{\partial p}{\partial x_1}, \frac{\partial p}{\partial x_2}, \frac{\partial p}{\partial x_3} \right)}, \quad (4.2.26)$$

wat zoals reeds besproken in het vorige hoofdstuk een vectorveld met, in dit geval, drie componenten geeft.

De gradiënt kan verder worden gecombineerd met een vectorveld tot de **divergentie van een vectorveld**. Neem als voorbeeld het linkerlid van de eerste wet van Gauss (4.2.19):

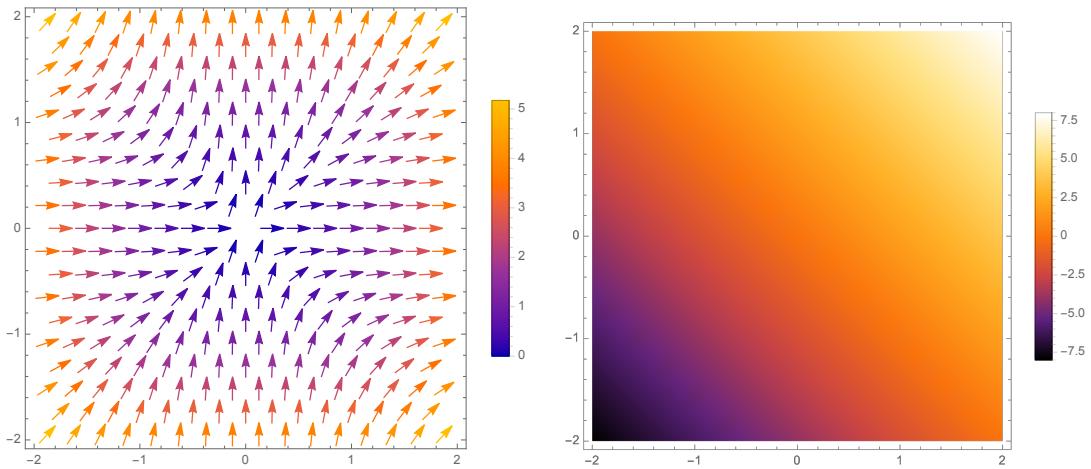
$$\boxed{\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \sum_i \frac{\partial E_i}{\partial x_i} = \partial_x E_x + \partial_y E_y + \partial_z E_z}. \quad (4.2.27)$$

De 'dot'(\cdot) geeft hier aan dat we wat betreft de vector-indices het scalair product moeten nemen. Zo levert de divergentie van een vectorveld een scalair veld op. Ruwweg gezegd geeft de divergentie van een vectorveld de mate waarin de veldlijnen divergeren of convergeren, zie figuur 4.2.

Een andere belangrijke afleidingsoperatie die we opbouwen met de gradient is de **Laplaciaan**. Deze vinden we als inproduct van de gradient met zichzelf:

$$\boxed{\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} = \vec{\nabla}^2 = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}}. \quad (4.2.28)$$

²Waar er wat betreft de Beatles nog steeds discussie is over de meest belangrijke Beatle (Paul of John) is het hier wel duidelijk dat alles begint bij de gradiënt operator. De drie andere bewerkingen die we hier bespreken volledig uit de definitie van de gradiënt samen met de toepassing van de standaard vectoriële definities.



Figuur 4.2: (a): Een vectorplot van het 2D vectorveld $\vec{V}(x, y) = (x^2, y^2)$ (of equivalent: het 3D vectorveld $\vec{V}(x, y, z) = (x^2, y^2, z^2)$) geplot in het $z = 0$ -vlak. (b) Een densityplot van de overeenkomstige divergentie: $\nabla \cdot \vec{V} = 2x + 2y$. De divergentie is negatief linksonder, waar de veldlijnen convergeren. Ze is positief rechtsboven, waar de veldlijnen divergeren. In het midden, linksboven en rechtsonder is de divergentie klein, de veldlijnen divergeren/convergeren daar nauwelijks.

Toegepast op een scalair veld geeft deze operator opnieuw een scalair veld, toegepast op een vectorveld geeft dit opnieuw een vectorveld. Bijvoorbeeld, voor de tweede term in het rechterlid van Navier-Stokes (4.2.24):

$$\vec{\nabla}^2 \vec{v} = (\vec{\nabla}^2 v_x, \vec{\nabla}^2 v_y, \vec{\nabla}^2 v_z). \quad (4.2.29)$$

Toepassing: de golfvergelijking. De Laplacian verschijnt ook in de golfvergelijking:

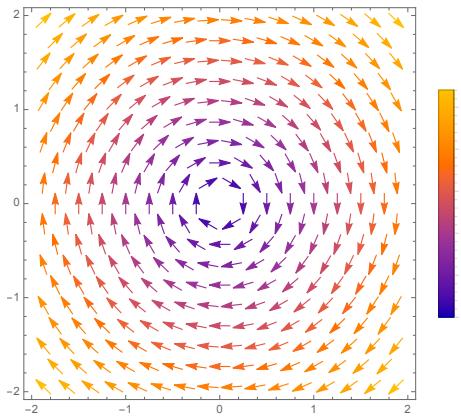
$$(\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c^2 \Delta) \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \Delta \phi = 0. \quad (4.2.30)$$

We gaan in hoofdstuk 7 nog uitgebreid in op deze vergelijking, in het bijzonder onderzoeken we daar de invloed van de randen. Ga hier alvast na dat het reëel veld $\phi(\vec{x}, t) = \phi_0 \exp^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.t.$ een oplossing vormt van deze vergelijking (met $\phi_0 \in \mathbb{C}$ een constante) wanneer $\omega = \|\vec{k}\|c$. Wat is de golflengte λ van deze golf? Wat is de frequentie ν ? Wat is de snelheid? En wat is de voortplantingsrichting?

Oplossing Door de anzats voor $\phi(\vec{x}, t)$ in (4.2.30) te pluggen vinden we onmiddellijk:

$$(-\omega^2 + c^2 \vec{k} \cdot \vec{k}) \phi_0 \exp^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} + c.t. = 0. \quad (4.2.31)$$

Willen we dat dit geldt voor elke (\vec{x}, t) dan vinden we $\omega^2 = \|\vec{k}\|^2 c^2$ of $\omega = \|\vec{k}\|c$ wanneer we ons beperken tot de positieve wortel. We kunnen deze oplossing verder nog schrijven als: $\phi(\vec{x}, t) = 2\text{Re}(\phi_0) \cos(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t) - 2\text{Im}(\phi_0) \sin(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)$. Door het functieverloop in \vec{x} en t te bekijken, is het meteen duidelijk dat dit een golf beschrijft



Figuur 4.3: Voor het vectorveld $\vec{A} = (0, 0, x^2 + y^2)$, de rotor $\vec{\nabla} \times \vec{A} = 2(y, -x, 0)$ geplot in een Z -vlak. Specifiek beschrijft deze rotor het snelheidsveld voor een vloeistof die 'star' mee roteert met een roterende emmer (hoekfrequentie $\omega = 2$) die de vloeistof bevat.

met frequentie $\nu = \omega/(2\pi) = ||\vec{k}||c/(2\pi)$, golflengte $\lambda = (2\pi)/||\vec{k}||$, snelheid $c = \lambda\nu$, en met voortplantingsrichting in de richting van \vec{k} . (Zie ook de toepassing 1.4.5).

Tot slot, bespreken we ook nog **de rotor van een vectorveld** (Engelse benaming: *curl*), die bijvoorbeeld verschijnt in de Maxwellvergelijkingen:

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ \frac{\partial}{\partial x_1} & \frac{\partial}{\partial x_2} & \frac{\partial}{\partial x_3} \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix}, \quad (4.2.32)$$

waar we opnieuw eenvoudigweg de vectoriële definities toepassen (in casu deze voor het vectorproduct) om de uitdrukking neer te schrijven. Ontwikkelen we de determinant naar de eerste rij dan vinden we meer expliciet:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \vec{B} &= \sum_{ijk} (\epsilon_{ijk} \frac{\partial B_k}{\partial x_j}) \vec{e}_i \\ &= (\frac{\partial B_3}{\partial x_2} - \frac{\partial B_2}{\partial x_3}) \vec{e}_1 + (\frac{\partial B_1}{\partial x_3} - \frac{\partial B_3}{\partial x_1}) \vec{e}_2 + (\frac{\partial B_2}{\partial x_1} - \frac{\partial B_1}{\partial x_2}) \vec{e}_3. \end{aligned} \quad (4.2.33)$$

De rotor toegepast op een vectorveld, geeft dus opnieuw vectorveld. Fysisch gezien, geeft een rotor een vectorveld dat een rotatie vertoont. Zo zal bijvoorbeeld een snelheidsveld van de vorm $\vec{v} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ een roterende vloeistof beschrijven, zie ook figuur 4.3.

4.2.3 Nabla calculus

Om uitdrukkingen met de $\vec{\nabla}$ -operator te begrijpen en te manipuleren is het, zoals hierboven al aangehaald, kwestie van zowel het vectorieel karakter als de werking van

de afgeleide correct te hanteren. Bij twijfel kan het hierbij soms handig zijn van de verschillende componenten expliciet uit te schrijven. Zo kunnen we als voorbeeld de derde term in de Navier-Stokes vergelijking herschrijven (met de verkorte notatie $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x_i}$):

$$\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{v}) = \vec{\nabla}\left(\sum_i \partial_i v_i\right) = \sum_i (\partial_1 \partial_i v_i, \partial_2 \partial_i v_i, \partial_3 \partial_i v_i). \quad (4.2.34)$$

Naast het uitschrijven in componenten zijn er ook een aantal handige identiteiten die je kan gebruiken bij de nabla-calculus, we geven ze hieronder. Hierbij zijn χ en ϕ scalaire velden en \vec{F} en \vec{G} algemene vectorvelden. Voor de gelijkheden met 1 (2) afgeleiden moeten de velden minstens 1 (2) keer continu differentieerbaar zijn.

$\vec{\nabla}(\phi + \chi) = \vec{\nabla}\phi + \vec{\nabla}\chi$ $\vec{\nabla} \cdot (\vec{F} + \vec{G}) = \vec{\nabla} \cdot \vec{F} + \vec{\nabla} \cdot \vec{G}$ $\vec{\nabla} \times (\vec{F} + \vec{G}) = \vec{\nabla} \times \vec{F} + \vec{\nabla} \times \vec{G}$ $\vec{\nabla} \cdot (\phi \vec{F}) = (\vec{\nabla}\phi) \cdot \vec{F} + \phi \vec{\nabla} \cdot \vec{F}$ $\vec{\nabla} \times (\phi \vec{F}) = (\vec{\nabla}\phi) \times \vec{F} + \phi \vec{\nabla} \times \vec{F}$ $\vec{\nabla} \cdot (\vec{F} \times \vec{G}) = \vec{G} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) - \vec{F} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{G})$ $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla}\phi) = \vec{0}$ $\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = 0$ $\vec{\nabla} \times (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{F}) - (\vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}) \vec{F}.$	$(4.2.35)$
---	------------

Als eerste voorbeeld bewijzen we de derde laatste identiteit:

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}\phi = ((\partial_y \partial_z \phi - \partial_z \partial_y)\phi, (\partial_z \partial_x \phi - \partial_x \partial_z)\phi, (\partial_x \partial_y \phi - \partial_y \partial_x)\phi) = (0, 0, 0), \quad (4.2.36)$$

wanneer ϕ twee-maal continu differentieerbaar is, zodat de afgeleiden commuteren.

Als tweede voorbeeld bewijzen we de voorlaatste identiteit:

$$\vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = (\vec{\nabla} \times \vec{\nabla}) \cdot \vec{F} = (\partial_y \partial_z - \partial_z \partial_y)F_x + (\partial_z \partial_x - \partial_x \partial_z)F_y + (\partial_x \partial_y - \partial_y \partial_x)F_z = 0. \quad (4.2.37)$$

Voor de eerste gelijkheid passen we (4.1.14) toe voor het gemengd product. De bekomen uitdrukking verdwijnt dan omdat het vectorproduct van gelijke vectoren (in dit geval de vectoroperator $\vec{\nabla}$) verdwijnt. Hiervoor moeten de partiële afgeleiden opnieuw commuteren, vandaar de eis dat \vec{F} twee-maal continu afleidbaar moet zijn opdat de gelijkheid geldt. Verifieer zelf de overige identiteiten!

Tot slot vermelden we nog drie mooie toepassingen van de nabla-calculus die je zelf als oefening (of in een bord/werk-college) kan uitwerken.

Toepassing 1: geen lokaal maximum van $\|\vec{B}\|$ of $\|\vec{E}\|$. ³

³Dit resultaat is bijvoorbeeld belangrijk bij experimenten met koude atomen, die men tracht te

Toon aan uit de Maxwellvergelijkingen (4.2.19)-(4.2.22) dat in het stationaire geval $\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0}$, $\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \vec{0}$ er weg van alle lading en stromen ($\rho = 0$, $\vec{j} = \vec{0}$) geen lokaal maximum voor de grootte van het magnetisch veld $\|\vec{B}\| = \sqrt{B_x^2 + B_y^2 + B_z^2}$ kan bestaan (het bewijs voor het analoge resultaat voor $\|\vec{E}\|$ is identiek). Hint: argumenteer eerst dat het hiervoor voldoende is van te bewijzen dat het spoor van de Hessiaan (zie vorig hoofdstuk §3.1.5) voor de functie $f(\vec{x}) = \vec{B} \cdot \vec{B}$ altijd positief is. Bewijs dit vervolgens.

Toepassing 2: And then there was light: elektromagnetische golven.

Leid uit de Maxwellvergelijkingen (4.2.19)-(4.2.22) zonder brontermen (lading $\rho = 0$, stroom $\vec{j} = 0$) twee golfvergelijkingen af voor zowel het elektrisch als magnetisch veld:

$$\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} - c^2 \Delta \vec{E} = \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} - c^2 \Delta \vec{B} = \vec{0}. \quad (4.2.38)$$

Wat vind je voor de lichtsnelheid c ?

Toepassing 3: Bernoulli uit Navier-Stokes.

Heel wat vloeistoffen zijn in goede benadering onsamendrukbaar, wat betekent dat de dichtheid ρ als constant kan verondersteld worden. Verder geldt in vele gevallen dat het snelheidsveld rotatievrij is $\vec{\nabla} \times \vec{v} = \vec{0}$. Zoals we zometeen bespreken impliceert dit dat \vec{v} conservatief is, het kan dan geschreven worden als de gradient van een scalair veld: $\vec{v} = \vec{\nabla} \phi$. Dit geldt ook algemeen voor het gravitatieveld $\vec{g} = -\vec{\nabla} V$. Toon aan dat in dit geval, de Navier-Stokes vergelijking (4.2.24) zich voor $\mu = 0$ en voor constante dichtheid ρ herleidt tot de Bernoulli vergelijking (met $f(t)$ een willekeurige functie van t):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{1}{2} (\vec{\nabla} \phi) \cdot (\vec{\nabla} \phi) + \frac{p}{\rho} + V = f(t). \quad (4.2.39)$$

Dit is de basisvergelijking voor onsamendrukbare vloeistoffen, met tal van toepassingen, gaande van de studie van het gedrag van zeegolven tot de beweging van vloeistoffen doorheen leidingen.

4.2.4 Conservatieve vectorvelden

Een continu vectorveld \vec{F} wordt conservatief genoemd als het kan geschreven worden als de gradient van een (continu differentieerbaar) scalair veld ϕ :

$$\boxed{\vec{F} = \vec{\nabla} \phi}, \quad (4.2.40)$$

vangen met magnetische velden. Het impliceert dat enkel de zogenaamde 'low field seekers' (= atomen waarvoor de energie $V \propto \|\vec{B}\|$ met een positieve voorfactor) magnetisch kunnen gevangen worden. Deze atomen worden immers aangetrokken tot een veldminimum en het is mogelijk van veldconfiguraties te genereren die dergelijk minimum vertonen. De 'high field seekers' $V \propto -\|\vec{B}\|$ kunnen op hun beurt niet magnetisch worden gevangen, aangezien er geen lokaal veldmaximum mogelijk is.

hierbij wordt ϕ dan de **scalaire potentiaal** van \vec{F} genoemd.

Wanneer een conservatief veld \vec{F} continu differentieerbaar is, dan is het corresponderende scalaire veld ϕ in (4.2.40) twee-maal continu differentieerbaar en hebben we dat (zie (4.2.36)):

$$\vec{\nabla} \times \vec{F} = \vec{0}, \quad (4.2.41)$$

dergelijk vectorveld noemen we **rotatievrij**. Een logische vraag is dan of ook de omgekeerde implicatie waar is: zijn rotatievrije vectorvelden automatisch ook conservatief? Dit blijkt inderdaad zo te zijn, alleen is er voorzichtigheid geboden met het gebied waarover de omgekeerde implicatie geldt. Er geldt algemeen dat elk vectorveld dat continu afleidbaar en rotatievrij is in een *enkelvoudig samenhangend gebied* Ω , in ditzelfde gebied kan geschreven worden als de gradiënt van een scalair veld (i.e. conservatief is). **Een samenhangend gebied** Ω in de Euclidische 3D ruimte is een gebied waarin elke twee punten kunnen worden verbonden door een continue kromme gelegen in dit gebied. Voor **een enkelvoudig samenhangend gebied** geldt bovendien dat elke continue gesloten kromme in dit gebied op een continue wijze kan worden ingekrompen tot een punt. Een volle cilinder is bijvoorbeeld een enkelvoudig samenhangend gebied. Sluiten we nu echter de punten gelegen binnen een kleinere cilinder (met dezelfde hoofdas) uit, dan is het nieuwe gebied nog steeds samenhangend, maar niet langer enkelvoudig samenhangend.

Samengevat: voor een continu differentieerbaar vectorveld in een enkelvoudig samenhangend gebied Ω geldt (we bewijzen de \Leftarrow implicatie hier niet, deze volgt uit de stelling van Stokes):

$\vec{F} = \vec{\nabla}\phi$	\Leftrightarrow	$\vec{\nabla} \times \vec{F} = \vec{0}$
conservatief		rotatievrij

(4.2.42)

Voorbeeld: Beschouw het vectorveld $\vec{F} = (\frac{y}{z}, \frac{x}{z}, -\frac{xy}{z^2})$ dat continu afleidbaar is over twee helften van \mathbb{R}^3 , het gebied Ω_+ van punten (x, y, z) met positieve z en het gebied Ω_- van punten met negatieve z . Is dit een conservatief vectorveld? Zoja, bepaal een scalair veld waarvoor $\vec{F} = \vec{\nabla}\phi$.

Oplossing: Om het al dan niet conservatief karakter van \vec{F} na te gaan, rekenen we eerst de rotor uit. Zowel voor $z > 0$ als $z < 0$ vinden we: $\vec{\nabla} \times \vec{F} = (0, 0, 0)$. Door de verschillende componenten van \vec{F} in ogenschouw te nemen, vinden we vervolgens $\phi = \frac{xy}{z}$ voor het scalaire veld.

Toepassing: Statische zwaartekrachtvelden of elektrische velden zijn conservatief, $\vec{g} = -\vec{\nabla}V_g$ of $\vec{E} = -\vec{\nabla}V_e$, met V_g (V_e) de gravitationele (elektrostatische) potentiaal. Zo krijgen we voor een puntlading met lading q :

$$\vec{E}(\vec{r}) = -\frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^3} \vec{r} \quad (4.2.43)$$

met r de afstand $r = ||\vec{r}||$ tot de puntlading. Toon aan dat we dan voor de elektrische scalaire potentiaal, $\vec{E} = -\vec{\nabla}V_e$, hebben dat:

$$V_e = \frac{q}{4\pi\epsilon r}. \quad (4.2.44)$$

Oplossing: Via de kettingregel vinden we:

$$\vec{\nabla}\left(\frac{1}{r}\right) = -\frac{1}{r^2}\vec{\nabla}(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}) = -\frac{1}{r^3}(x, y, z) = -\frac{\vec{r}}{r^3}, \quad (4.2.45)$$

waaruit het gestelde volgt.

4.2.5 Solenoïdale vectorvelden

Een continu vectorveld \vec{F} dat kan geschreven worden als een rotor:

$$\vec{F} = \vec{\nabla} \times \vec{A}, \quad (4.2.46)$$

noemen we **solenoidaal** (zie bvb. figuur 4.3), het vectorveld \vec{A} in kwestie wordt **de vectorpotentiaal** genoemd. Uit (4.2.37) is het onmiddellijk duidelijk dat een continu afleidbaar solenoïdale vectorveld **divergentievrij** is:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0. \quad (4.2.47)$$

Binnen enkelvoudige samenhangende gebieden geldt opnieuw de omgekeerde implicatie (we bewijzen dit hier niet):

$\vec{F} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$	\Leftrightarrow	$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0$
solenoidaal		divergentievrij

(4.2.48)

Zo zien we uit de tweede wet van Gauss (4.2.20) dat magneetvelden altijd solenoïdaal zijn.

Bemerkt tot slot dat voor solenoïdale vectorvelden, de vectorpotentiaal \vec{A} **niet uniek bepaald is**. Voor:

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla}\chi, \quad (4.2.49)$$

met χ een arbitrair twee-maal continu differentieerbaar scalair veld krijgen we dezelfde \vec{F} . (Dit volgt opnieuw uit (4.2.36).)

Voorbeeld. Beschouw het vectorveld $\vec{F} = (z, x, y)$. Is dit vectorveld solenoïdaal? Zoja, bepaal een vectorpotentiaal \vec{A} .

Oplossing: We zien onmiddellijk dat $\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 0$, het vectorveld is dus inderdaad solenoïdaal. \vec{A} moet dan voldoen aan:

$$\partial_y A_z - \partial_z A_y = z \quad \partial_z A_x - \partial_x A_z = x \quad \partial_x A_y - \partial_y A_x = y \quad (4.2.50)$$

We gebruiken nu de vrijheid (4.2.49) om A_z gelijk aan nul te stellen. Dit kan inderdaad altijd: voor een gegeven (A_x, A_y, A_z) vinden we met $\chi(x, y, z) = -\int_{z_0}^z dz' A_z(x, y, z')$ een nieuwe vectorpotentiaal $\vec{A}' = (A'_x, A'_y, 0)$.

Uit de eerste twee vergelijkingen van (4.2.50) vinden we dan:

$$A_y = -\frac{z^2}{2} + f(x, y) \quad A_x = zx + g(x, y), \quad (4.2.51)$$

voor algemene functies $f(x, y)$ en $g(x, y)$. De derde vergelijking wordt dan:

$$\partial_x f - \partial_y g = y, \quad (4.2.52)$$

met als mogelijke oplossing $f = yx$ en $g = 0$. We vinden dus dat:

$$\vec{A} = (zx, -\frac{z^2}{2} + yx, 0), \quad (4.2.53)$$

een vectorpotentiaal voor $\vec{F} = (z, x, y)$ is, wat je makkelijk kan controleren.

4.2.6 De Helmholtz decompositie

Een algemeen continu differentieerbaar vectorveld kan in een enkelvoudig samenhangend gebied altijd worden ontbonden in een conservatief en een solenoïdaal vectorveld. Men spreekt over de Helmholtz decompositie:

$$\boxed{\vec{F} = \vec{\nabla}\phi + \vec{\nabla} \times \vec{A}}, \quad (4.2.54)$$

waarbij de eerste term dus een conservatief vectorveld vormt en de tweede term een solenoïdaal vectorveld. Deze ontbinding wordt gevonden door vooreerst de divergentie van linker- en rechterlid te nemen:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \Delta\phi, \quad (4.2.55)$$

Bemerk dat deze **Poissonvergelijking** voor ϕ altijd een oplossing heeft. In het bijzonder vindt men voor algemene bronterm $\rho(\vec{x})$ (die voldoende snel naar nul gaat op oneindig) een oplossing van

$$\Delta\phi(\vec{x}) = \rho(\vec{x}), \quad (4.2.56)$$

als een volume-integraal over $V = \mathbb{R}^3$:

$$\phi(\vec{x}) = - \int_V d^3x' \frac{\rho(\vec{x}')}{4\pi||\vec{x} - \vec{x}'||}. \quad (4.2.57)$$

Soms kan een oplossing ook gewoon worden afgelezen, zonder gebruik te maken van (4.2.57), dit zal veelal het geval zijn bij de eenvoudige voorbeelden die we hier in de cursus geven.

Verder is het dan duidelijk dat voor een oplossing ϕ ,

$$\vec{F}' = \vec{F} - \vec{\nabla}\phi, \quad (4.2.58)$$

een divergentievrij vectorveld is. Wegens (4.2.48) is dit ook solenoïdaal, zodat het kan geschreven worden als $\vec{F}' = \vec{\nabla} \times \vec{A}$, wat precies de ontbinding (4.2.54) oplevert.

Het is belangrijk van hier op te merken dat de **Helmholtz ontbinding niet uniek is**. Elk vectorveld $\vec{G} = \vec{\nabla} \chi$ met χ een algemene harmonische functie, i.e. een veld dat oplossing is van de homogene Poissonvergelijking:

$$\Delta \chi = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \chi = 0, \quad (4.2.59)$$

is immers zowel conservatief als solenoïdaal. Zo kunnen we een Helmholtz ontbinding altijd herschrijven:

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \vec{\nabla} \phi + \vec{G} + \vec{\nabla} \times \vec{A} - \vec{G} \\ &= (\vec{\nabla} \phi + \vec{\nabla} \chi) + (\vec{\nabla} \times \vec{A} - \vec{\nabla} \chi) \\ &= \vec{\nabla} \phi' + \vec{\nabla} \times \vec{A}', \end{aligned} \quad (4.2.60)$$

met $\phi' = \phi + \chi$ en $\vec{\nabla} \times \vec{A}' = \vec{F} - \vec{\nabla} \phi'$, wat even goed een Helmholtz ontbinding vormt.

Voorbeeld: Geef een Helmholtzontbinding voor het vectorveld $\vec{F} = (x, z, y)$.

Oplossing: We vinden

$$\Delta \phi = \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = 1, \quad (4.2.61)$$

met als (niet unieke!) oplossing

$$\phi = \frac{x^2}{2}. \quad (4.2.62)$$

We schrijven dan de vergelijking $\vec{\nabla} \times \vec{A} = \vec{F} - \vec{\nabla} \phi = (0, z, y)$ in componenten uit (waarbij we meteen $A_z = 0$ stellen, zie het vorige voorbeeld):

$$-\partial_z A_y = 0 \quad \partial_z A_x = z \quad \partial_x A_y - \partial_y A_x = y, \quad (4.2.63)$$

waaruit we een oplossing $A_y = 0$ en $A_x = \frac{1}{2}(z^2 - y^2)$ vinden. Brengen we alles samen, dan vinden we dus een Helmholtz decompositie (4.2.54) van $\vec{F} = (x, z, y)$, met $\phi = x^2/2$ en $\vec{A} = (\frac{1}{2}(z^2 - y^2), 0, 0)$, zoals je makkelijk kan controleren.

4.3 Integratie

In het vorige hoofdstuk bespraken we algemene volume-integralen in \mathbb{R}^n , deze volumes zelf hebben dimensie $D = n$, meerbepaald $D = 3$ voor het geval van de 3D Euclidische ruimte die we hier beschouwen. Hier bespreken we verschillende types integralen over lager dimensionele 'oppervlakken' ingebed in een hoger-dimensionele ruimte. Meer concreet zullen we het hebben over integralen over 1D krommen en 2D oppervlakken ingebed in de 3D Euclidische ruimte.

4.3.1 Lijnintegralen

Een lijnintegraal is een integraal langs een gladde kromme \mathcal{C} . Dergelijke kromme wordt bepaald door een parametervergelijking $\vec{x}(t)$, waarbij over het beschouwde interval $[a, b]$ voor t de continu afleidbare afbeelding $t \rightarrow \vec{x}(t)$ *injectief* is, zodat er met elk 'tijdstip' t precies één punt van de kromme \mathcal{C} overeenkomt. We onderscheiden verschillende types lijnintegralen, naargelang de integratiemaat die gehanteerd wordt.

A) Booglengte, dichtheid, massamiddelpunt,...: $\int ds(\dots)$

Willen we bijvoorbeeld de lengte van een draad berekenen, dan dient de integratie de som van de infinitesimale lengtes ds langs de draad te geven. We vinden de uitdrukking voor de infinitesimale lengte ds , corresponderend aan een infinitesimale coördinaatverplaatsing $d\vec{x}$ onmiddellijk uit de Euclidische meetkunde:

$$ds = \sqrt{d\vec{x} \cdot d\vec{x}} \quad (4.3.64)$$

Zo vinden we dan voor de zogenaamde booglengte:

$$\ell = \int_C ds = \int_C \sqrt{d\vec{x} \cdot d\vec{x}} = \int_a^b dt \sqrt{\frac{d\vec{x}(t)}{dt} \cdot \frac{d\vec{x}(t)}{dt}}. \quad (4.3.65)$$

In de laatste gelijkheid maken we de uitdrukking $ds = \sqrt{d\vec{x} \cdot d\vec{x}}$ explicet door het invoeren van een bepaalde parametrisatie $t \in [a, b] \rightarrow \vec{x}(t)$ van de kromme \mathcal{C} , waarbij via de kettingregel:

$$d\vec{x} = \frac{d\vec{x}}{dt} dt. \quad (4.3.66)$$

Bemerк dat hierbij $\frac{d\vec{x}}{dt}$ een **raakvector** aan de kromme \mathcal{C} in het punt $\vec{x}(t)$ is: de rechte met richting bepaald door deze raakvector, door het punt $\vec{x}(t)$, is **de raakrechte** in het desbetreffende punt. Belangrijk is ook van op te merken dat per constructie de integraal (4.3.65) **onafhankelijk is van de specifieke parametervoorstelling**. In het bijzonder **hangt deze lijnintegraal niet af van de zin waarmee de kromme** door een bepaalde parametervoorstelling **wordt doorlopen** (zie ook het voorbeeld hieronder). Behalve de lengte (4.3.65) kunnen we natuurlijk ook algemeen scalaire velden met de maat ds integreren:

$$\int_C ds \phi(\vec{x}) = \int_a^b dt \sqrt{\frac{d\vec{x}(t)}{dt} \cdot \frac{d\vec{x}(t)}{dt}} \phi(\vec{x}(t)), \quad (4.3.67)$$

of ook nog vectorfuncties:

$$\int_C ds \vec{F}(\vec{x}) = \int_a^b dt \sqrt{\frac{d\vec{x}(t)}{dt} \cdot \frac{d\vec{x}(t)}{dt}} \vec{F}(\vec{x}(t)). \quad (4.3.68)$$

Per constructie zijn deze integralen opnieuw **volledig onafhankelijk van de parametrisatie**. Voor $\phi(\vec{x}) = \rho(\vec{x})$ de massadichtheid, geeft deze eerste integraal dan

bijvoorbeeld de massa M van de draad. Op zijn beurt zal dan $\vec{F}(\vec{x}) = \rho(\vec{x}) \times (x, y, z)$ in de tweede integraal, ons dan de massa M maal het massamiddelpunt $\vec{x}_{m.m.}$ geven: $M \times (x_{m.m.}, y_{m.m.}, z_{m.m.})$.

Bemerkt tot slot dat de beschouwde krommes \mathcal{C} verschillende eindpunten \vec{x}_a en \vec{x}_b of gelijke eindpunten $\vec{x}_a = \vec{x}_b$ (=gesloten kromme) kunnen hebben. In het laatste geval spreken we ook nog over een **contourintegraal** of **kringintegraal**, wat we typisch expliciet in het integratieteken weergeven:

$$\oint_{\mathcal{C}} ds (\dots) \quad (4.3.69)$$

Voorbeeld. Bereken de lengte-integraal (4.3.65) voor het halve cirkelsegment

$$(x, y, z) = (\cos \theta, \sin \theta, 0), \quad \text{met } \theta \in [0, \pi], \quad (4.3.70)$$

voor 2 parametrisaties. Gebruik voor de eerste parametrisatie $t = \theta$ en voor de tweede parametrisatie $t = y$, de cartesische y -coördinaat.

Oplossing: Voor de eerste parametrisatie vinden we $\frac{d\vec{x}}{d\theta} = (-\sin \theta, \cos \theta)$ en daaruit:

$$\frac{d\vec{x}}{d\theta} \cdot \frac{d\vec{x}}{d\theta} = 1. \quad (4.3.71)$$

Zodoende wordt de lengte-integraal (4.3.65):

$$\ell = \int_0^\pi d\theta = \pi. \quad (4.3.72)$$

Voor de tweede parametrisatie $t = y$ verdelen we vooreerst de gevraagde totale kromme in twee segmenten \mathcal{C}_1 en \mathcal{C}_2 links en rechts van de Y -as. We krijgen dan volgende parametrisaties:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 : \quad (x, y, z) &= (-\sqrt{1-y^2}, y, 0) \quad \text{met } y \in [0, 1] \\ \mathcal{C}_2 : \quad (x, y, z) &= (+\sqrt{1-y^2}, y, 0) \quad \text{met } y \in [0, 1] \end{aligned} \quad (4.3.73)$$

Nu hebben we: $\frac{d\vec{x}}{dy} = (\pm \frac{y}{\sqrt{1-y^2}}, 1, 0)$ en zodus:

$$\frac{d\vec{x}}{dy} \cdot \frac{d\vec{x}}{dy} = \frac{y^2}{1-y^2} + 1 = \frac{1}{1-y^2}. \quad (4.3.74)$$

Zo vinden we dan:

$$\ell = \ell_1 + \ell_2 = 2 \times \int_0^1 dy \frac{1}{\sqrt{1-y^2}} = \pi. \quad (4.3.75)$$

Bemerkt dat het linker-segment \mathcal{C}_1 (als functie van $y \in [0, 1]$) hier in tegengestelde richting wordt doorlopen als het segment \mathcal{C}_2 en als het door θ geparametriseerde volledige segment \mathcal{C} . Bemerkt ook dat voor dit voorbeeld $t = \theta$ duidelijk de slimmere keuze is, de y -parametrisatie werd hier genomen om expliciet te illustreren dat de lengte-integraal onafhankelijk is van de zin waarin de kromme wordt doorlopen.

Voorbeeld. Bereken de massa en het massamiddelpunt van de solenoïdale draad met uniforme dichtheid ρ , gelegen volgens de kromme:

$$(x, y, z) = (R \cos \theta, R \sin \theta, z_0 \theta) \quad \text{met} \quad \theta \in [0, \theta_0]. \quad (4.3.76)$$

Oplossing: We kiezen $t = \theta$ en hebben dan:

$$\frac{d\vec{x}}{d\theta} \cdot \frac{d\vec{x}}{d\theta} = R^2(\sin^2 \theta + \cos^2 \theta) + z_0^2 = R^2 + z_0^2. \quad (4.3.77)$$

Voor de massa vinden we dan:

$$M = \rho \int_0^{\theta_0} d\theta \sqrt{R^2 + z_0^2} = \rho \theta_0 \sqrt{R^2 + z_0^2}. \quad (4.3.78)$$

Verder vinden we dan voor het massamiddelpunt:

$$\begin{aligned} M(x_{m.m.}, y_{m.m.}, z_{m.m.}) &= \rho \int_0^{\theta_0} d\theta \sqrt{R^2 + z_0^2} (R \cos \theta, R \sin \theta, z_0 \theta) \\ &= \rho \sqrt{R^2 + z_0^2} (R \sin \theta_0, R(1 - \cos \theta_0), z_0 \frac{\theta_0^2}{2}), \end{aligned} \quad (4.3.79)$$

en daaruit tot slot:

$$\vec{x}_{m.m.} = \left(R \frac{\sin \theta_0}{\theta_0}, R \frac{1 - \cos \theta_0}{\theta_0}, z_0 \frac{\theta_0^2}{2} \right). \quad (4.3.80)$$

B) Vectorvelden: $\int \vec{F} \cdot d\vec{x}$, $\int \vec{F} \times d\vec{x}$

In (4.3.68) toonden we al een mogelijke integraal van een vectorveld. Het vectoriële karakter van de coördinaatdifferentiaal geeft nog meer mogelijkheden. Zo kunnen we volgende integraal definiëren:

$$\int_{\mathcal{C}} \vec{F}(\vec{x}) \cdot d\vec{x} = \int_b^a dt \vec{F}(\vec{x}(t)) \cdot \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \int_b^a dt \sum_i F_i(x_1, x_2, x_3) \frac{dx_i}{dt}, \quad (4.3.81)$$

waarbij we voor de eerste gelijkheid opnieuw de kettingregel (4.3.66) voor de differentiaal gebruiken. In tegenstelling tot de lijnintegralen met maat ds hangt deze lijnintegral af van het teken van dx_i/dt , zodoende zal **het teken van deze lijnintegraal afhangen van de zin waarin de kromme \mathcal{C} wordt doorlopen**.

In het vorige hoofdstuk ontmoetten we reeds dit type integraal voor een conservatief vectorveld $\vec{F} = \vec{\nabla}\phi$ (zie verg. (3.1.26)). Daar vonden we dan dat:

$$\int_{\mathcal{C}} \vec{\nabla}\phi(\vec{x}) \cdot d\vec{x} = \phi(\vec{x}_b) - \phi(\vec{x}_a) \quad (4.3.82)$$

voor de kromme doorlopen van \vec{x}_a naar \vec{x}_b .

Nog een ander type lijnintegraal krijgen we door het vectorieel product te gebruiken:

$$\int_C \vec{F}(\vec{x}) \times d\vec{x} = \int_b^a dt \vec{F}(\vec{x}(t)) \times \frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \int_b^a dt (F_y \dot{z} - F_z \dot{y}, F_z \dot{x} - F_x \dot{z}, F_x \dot{y} - F_y \dot{x}), \quad (4.3.83)$$

waarbij we opnieuw de kettingregel (4.3.66) voor de differentiaal gebruiken en $d\vec{x}/dt = (\dot{x}, \dot{y}, \dot{z})$ noteren.

Voorbeeld. Bereken de lijnintegraal (4.3.81) voor het vectorveld $\vec{F} = (z, x, y)$ langs de solenoïdale kromme van het vorige voorbeeld (4.3.76) voor het eindpunt $\theta_0 = \frac{3\pi}{2}$.

Oplossing: Gebruiken we opnieuw de parametrisatie volgens θ dan vinden we:

$$\begin{aligned} \int_C \vec{F} \cdot d\vec{x} &= \int_0^{\frac{3\pi}{2}} d\theta (z_0 \theta, R \cos \theta, R \sin \theta) \cdot (-R \sin \theta, R \cos \theta, z_0) \\ &= \int_0^{\frac{3\pi}{2}} d\theta R^2 \cos^2 \theta + R z_0 \sin \theta (1 - \theta) \\ &= \frac{3}{4} \pi R^2 + 2 z_0 R. \end{aligned} \quad (4.3.84)$$

Toepassing: arbeid, elektromotorische kracht.

Voor een krachtveld \vec{F} zal de lijnintegraal $\int_C \vec{F} \cdot d\vec{x}$ de **totale arbeid** W geven die wordt verricht op een deeltje, onderhevig aan de kracht \vec{F} , na het doorlopen van de kromme C . Voor een conservatief krachtveld $\vec{F} = -\vec{\nabla}V$ vinden we dan onmiddellijk (zie (4.3.82)) dat $W = -\Delta V = -(V(\vec{x}_b) - V(\vec{x}_a))$: de toename in kinetische energie $\Delta E_k = W$ van het deeltje is gelijk aan de afname van de potentiaal, zodat de totale energie $E = E_k + V$ behouden blijft. (Dit verklaart ook meteen waarom we over een 'conservatief' vectorveld spreken, er kan een behoudswet ('conservatie' van energie) aan worden geassocieerd.)

Een veelgebruikte grootheid, bijvoorbeeld in de context van dynamo's, is de **elektromotorische kracht** (EMF). Deze wordt voor een gesloten stroomkring gedefinieerd als de energietoename van een deeltje met eenheidslading dat éénmaal de stroomkring C doorloopt. In het ruststelsel van de stroomkring (= het referentiestelsel waarin de stroomkring in rust is) wordt deze gegeven door:

$$EMF = \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{x}, \quad (4.3.85)$$

met $\vec{E}(x, y, z)$ het elektrische veld waarin de stroomdraad zich bevindt.

Toepassing: Biot-Savart. Dit is een belangrijke toepassing van de lijnintegraal met het vectorieel product, $\int_C \vec{F} \times d\vec{x}$. Het magnetisch veld rond een dunne stroomdraad waarin een constante stroom I loopt, wordt gegeven door:

$$\vec{B}(\vec{x}) = \frac{\mu_0 I}{4\pi} \int_C \frac{d\vec{x}' \times (\vec{x} - \vec{x}')}{||\vec{x} - \vec{x}'||^3}, \quad (4.3.86)$$

waarbij de integraal loopt over de kromme \mathcal{C} die de stroomdraad $\vec{x}'(t)$ beschrijft. We laten het als een **oefening** om als voorbeeld aan te tonen dat voor een *oneindig* lange rechte stroomdraad langs de Z -as het resulterende magneetveld dan wordt gegeven door:

$$\vec{B}(x, y, z) = \frac{\mu_0 I}{2\pi} \left(\frac{y}{x^2 + y^2}, -\frac{x}{x^2 + y^2}, 0 \right). \quad (4.3.87)$$

4.3.2 Oppervlakteintegralen

Hier beschouwen we integralen over algemene gekromde gladde 2D oppervlakken S . Een algemeen oppervlak wordt geparametriseerd via 2 coördinaten $(u, v) \in \Omega$ met $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ een open samenhangend deelgebied van \mathbb{R}^2 . Het gladde oppervlak (of een deel van het oppervlak) wordt dan bepaald door de injectieve en continu afleidbare afbeelding $(u, v) \rightarrow \vec{x}(u, v)$, waarbij er dus met elke (u, v) precies één punt op het oppervlak S overeenkomt.

Als integratiemaat voor de oppervlakteintegralen nemen we:

$$d\sigma = \left\| \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right\| dudv. \quad (4.3.88)$$

Hierbij vormen de vectoren $\frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u}$ en $\frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v}$ twee raakvectoren aan het oppervlak S . Meerbepaald is $\frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u}|_{(u,v)=(u_0,v_0)}$ ($\frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v}|_{(u,v)=(u_0,v_0)}$) de raakvector aan de zogenaamde coördinaatlijn $\mathcal{C}_{v_0} = \vec{x}(u, v_0)$ ($\mathcal{C}_{u_0} = \vec{x}(u_0, v)$) die loopt op het oppervlak S . Elke raakvector in het punt $\vec{x}(u_0, v_0)$ voor een algemene kromme \mathcal{C} op het oppervlak S zal een lineaire combinatie zijn van deze twee raakvectoren. Samen spannen ze het **raakvlak** op aan S in het punt $\vec{x}(u, v)$.

Uit de definitie van het vectorieel product (§ 4.1.2) weten we dat deze uitdrukking (4.3.88) ons de oppervlakte geeft van het (infinitesimale) parallellogram bepaald door de infinitesimale coördinaatverplaatsingen $d\vec{x}_u = \frac{\partial \vec{x}}{\partial u} du$ en $d\vec{x}_v = \frac{\partial \vec{x}}{\partial v} dv$:

$$d\sigma = \|d\vec{x}_u \times d\vec{x}_v\|, \quad (4.3.89)$$

zodat dit inderdaad de juiste maat is wanneer we bijvoorbeeld de oppervlakte willen berekenen. Per constructie hebben we dat **deze integratiemaat onafhankelijk is van de parametrisatie**. Je kan zelf als formele **oefening** aantonen dat:

$$d\sigma = \left\| \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right\| dudv = \left\| \frac{\partial \vec{x}'(u', v')}{\partial u'} \times \frac{\partial \vec{x}'(u', v')}{\partial v'} \right\| du' dv', \quad (4.3.90)$$

voor een nieuwe parametrisatie $\vec{x}'(u', v') = \vec{x}(u, v)$.

Gegeven de uitdrukking (4.3.88) wordt de oppervlakte van een 2D oppervlak dan gegeven door:

$$A = \int_S d\sigma = \int_{\Omega} dudv \left\| \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right\|. \quad (4.3.91)$$

Net als bij lijnintegralen kunnen we ook de oppervlakteintegralen beschouwen van scalaire velden $\phi(\vec{x})$ of vectorvelden $\vec{F}(\vec{x})$:

$$\begin{aligned}\int_S d\sigma \phi(\vec{x}) &= \int_{\Omega} dudv \left| \left| \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right| \right| \phi(\vec{x}(u, v)) \\ \int_S d\sigma \vec{F}(\vec{x}) &= \int_{\Omega} dudv \left| \left| \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right| \right| \vec{F}(\vec{x}(u, v)),\end{aligned}\quad (4.3.92)$$

waarbij we dan bijvoorbeeld met $\phi(\vec{x}) = \rho(\vec{x})$ (de dichtheid), dan de massa kunnen berekenen, of met $\vec{F} = \rho(\vec{x})(x, y, z)$ het massamiddelpunt kunnen bepalen.

Voorbeeld. Bereken de oppervlakte voor het randoppervlak van een bol met straal R .

Oplossing: Voor de parametrisatie van het boloppervlak kiezen we de bolcoördinaten (θ, φ) , met dus $(x, y, z) = (R \sin \theta \cos \varphi, R \sin \theta \sin \varphi, R \cos \theta)$. We hebben dan:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial \theta} = (R \cos \theta \cos \varphi, R \cos \theta \sin \varphi, -R \sin \theta) \quad \frac{\partial \vec{x}}{\partial \varphi} = (-R \sin \theta \sin \varphi, R \sin \theta \cos \varphi, 0), \quad (4.3.93)$$

waaruit:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial \varphi} = (R^2 \sin^2 \theta \cos \varphi, R^2 \sin^2 \theta \sin \varphi, R^2 \cos \theta \sin \theta). \quad (4.3.94)$$

En verder dan:

$$\left| \left| \frac{\partial \vec{x}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial \varphi} \right| \right| = \sqrt{R^4 \sin^4 \theta + R^4 \cos^2 \theta \sin^2 \theta} = \sqrt{R^4 \sin^2 \theta} = R^2 \sin \theta. \quad (4.3.95)$$

Zo vinden we voor de oppervlakte:

$$A = \int_S d\sigma = R^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi = R^2 (2\pi) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) = 4\pi R^2, \quad (4.3.96)$$

wat de gekende uitdrukking voor de oppervlakte van de bol geeft.

Voor oppervlakteintegralen van vectorvelden hebben we ook nog de volgende aan $d\sigma$ gerelateerde integratiemaat:

$$d\vec{\sigma} = \vec{n} d\sigma = \left(\frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial u} \times \frac{\partial \vec{x}(u, v)}{\partial v} \right) dudv,$$

(4.3.97)

met \vec{n} dan de eenheidsvector orthogonaal op het infinitesimale oppervlak bepaald door $d\vec{x}_u$ en $d\vec{x}_v$. **Deze integratiemaat is onafhankelijk van de parametrisatie (u, v) op het teken van \vec{n} na.** Bemerk dat het teken van \vec{n} verandert onder verwisseling van u en v . Voor open oppervlakken is er niet echt een voorkeursrichting voor \vec{n} , voor gesloten oppervlakken zullen we per conventie \vec{n} buitenwaarts gericht nemen. In

ieder geval wil je bij de toepassing van (4.3.97) steeds nagaan dat de richting van \vec{n} overeenkomt met wat je wilt berekenen.

Voorbeeld. Bereken voor de cilinder $V \{x^2 + y^2 \leq R^2, 0 \leq z \leq h\}$ de integraal $\int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F}$ over het randoppervlak, voor $\vec{F} = (x, y, 0)$.

Oplossing: Het is meteen duidelijk dat deze integraal verdwijnt voor het boven- en ondervlak (de twee cirkels), aangezien $\vec{n} = (0, 0, \pm 1)$ voor deze vlakken. Voor het zijoppervlak gebruiken we de poolcoördinaten θ en z : $(x, y, z) = (R \cos \theta, R \sin \theta, z)$. We krijgen dan:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial \theta} = (-R \sin \theta, +R \cos \theta, 0) \quad \frac{\partial \vec{x}}{\partial z} = (0, 0, 1), \quad (4.3.98)$$

en hieruit:

$$\frac{\partial \vec{x}}{\partial \theta} \times \frac{\partial \vec{x}}{\partial z} = (R \cos \theta, R \sin \theta, 0) = R \vec{n}, \quad (4.3.99)$$

met $\vec{n} = (\cos \theta, \sin \theta, 0)$ de naar buiten gerichte normaal-eenheidsvector. De gevraagde integraal wordt dan:

$$\int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F} = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^h dz R(\cos \theta, \sin \theta, 0) \cdot (R \cos \theta, R \sin \theta, 0) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^h dz R^2 = 2\pi R^2 h. \quad (4.3.100)$$

In de twee bovenstaande voorbeelden werkten we $d\vec{\sigma}$ uit voor de (θ, φ) bolcoördinaten (rand van de bol) en de (θ, z) poolcoördinaten (zijrand van de cilinder). Deze uitdrukkingen komen algemeen van pas, we schrijven deze hier daarom nog eens expliciet neer.

$$\begin{aligned} (x, y, z) &= (R \cos \theta, R \sin \theta, z) \\ &\downarrow \\ d\vec{\sigma} = \vec{n} d\sigma &= (\cos \theta, \sin \theta, 0) R d\theta dz \end{aligned} \quad (4.3.101)$$

$$\begin{aligned} (x, y, z) &= (R \sin \theta \cos \varphi, R \sin \theta \sin \varphi, R \cos \theta) \\ &\downarrow \\ d\vec{\sigma} = \vec{n} d\sigma &= (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) R^2 \sin \theta d\theta d\varphi \end{aligned} \quad (4.3.102)$$

Toepassing: flux doorheen een oppervlak. Voor \vec{j} een *stroomdichtheid*, geeft de oppervlakte integraal

$$I = \int_S d\vec{\sigma} \cdot \vec{j}, \quad (4.3.103)$$

de totale stroom door het oppervlak S . Willen we bijvoorbeeld de totale elektrische stroom I door een geleider (Coulomb/sec) dan integreren we de elektrische stroom dichtheid \vec{j} (zie Maxwellvergelijkingen) over een doorsnede van de geleider. Een ander

voorbeeld is de berekening van het debiet (kg/sec) voor water dat door een buis stroomt, hiervoor dienen we $\vec{j} = \rho\vec{v}$ (zie de continuïteitsvergelijking (4.2.23)) te integreren.

Oefening: Bereken het debiet D (in kg/sec) voor water met constante dichtheid $\rho_0 = 1000 \text{ kg/m}^3$, dat door een cilindrische buis stroomt met (laminair) snelheidsveld: $\vec{v} = v_0(0, 0, (1 - \rho^2/R^2))$ met $v_0=2\text{m/sec}$, waarbij we de z-as volgens de hoofdas van de cilinder leggen, waarbij $R = 0.1\text{m}$ de straal is van de cilinder en waarbij ρ de radiële poolcoördinaat is.

Opmerking: Voor deze berekening neem je logischerwijs als doorsnede S voor de cilinder, een cirkel met straal R . Je kan echter ook nagaan dat het verkregen resultaat onafhankelijk is van de keuze voor S , zolang dit oppervlak de cilinder maar volledig doorsnijdt. Dit is algemeen het geval voor elk divergentievrij stroomvectorveld, waarvoor dus $\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0$, zie § 4.4.3.

4.4 Integratiestellingen

Voor 1D integralen hebben we dat de integraal van een totaal afgeleide df/dt zich herleidt tot de evaluatie van functiewaarden $f(t_b)$ en $f(t_a)$ op de rand van het interval, zie ook de lijnintegraal van een gradient (4.3.82). De analoge resultaten in hogere dimensies zijn in zekere zin krachtiger en eleganter. In het bijzonder hebben we voor 2D integratiegebieden dat een oppervlakte-integraal van de rotor van een vectorveld zich herleidt tot een lijnintegraal over de rand (**stelling van Stokes**). Voor 3D integratiegebieden hebben we dat een volume-integraal van de divergentie van een vectorveld zich herleidt tot een oppervlakte-integraal over het randoppervlak (**divergentiestelling/stelling van Gauss**).

4.4.1 Stelling van Green en Stokes

Omstandig bewijs

Om tot de stelling van Stokes te komen, beginnen we met de stelling van Green, die een oppervlakte integraal over een gebied R in \mathbb{R}^2 leert aan een lijnintegraal over de rand van dit gebied. Meerbepaald zegt **de stelling van Green** dat voor een algemeen continu afleidbaar 2D vectorveld $\vec{F} = (f_1(x, y), f_2(x, y))$ in een open samenhangend gebied R geldt dat:

$$\int_R dx dy (\partial_x f_2 - \partial_y f_1) = \oint_{C^+} d\vec{x} \cdot \vec{F}, \quad (4.4.104)$$

waarbij de kring-lijnintegraal loopt over de rand van R in positief draaiende richting. We bewijzen deze stelling voor een *normaalgebied*, i.e. een gebied dat zowel $X-$ als $Y-$ projecteerbaar is. Zie figuur 3.2 van het vorige hoofdstuk voor dergelijk gebied. Verwijzend naar deze figuur en bijhorende uitleg en notaties, werken we de twee termen in het linkerlid van de stelling van Green (4.4.104) uit. Voor de eerste term schrijven

we:

$$\begin{aligned}
 \int_R dx dy \partial_x f_2 &= \int_c^d dy \int_{x_1(y)}^{x_2(y)} dx \partial_x f_2 \\
 &= \int_c^d dy (f_2(x_2(y), y) - f_2(x_1(y), y)) \\
 &= \int_c^d dy f_2(x_2(y), y) + \int_d^c dy f_2(x_1(y), y) \\
 &= \oint_{\mathcal{C}^+} dy f_2(x, y).
 \end{aligned} \tag{4.4.105}$$

Op de tweede lijn gebruiken we hier dat de 1D integraal van de totaal afgeleide (als functie van x) $\partial_x f_2$ zich herleidt tot het functieverschil op de randpunten. Op de vierde lijn identificeren we met de kringintegraal over de rand \mathcal{C} , waarbij het segment VUT van T naar V wordt doorlopen, en het segment VST van V naar T , wat overeenkomt met een positieve draaizin (=tegenwijzerzin). Volledig analoog vinden we voor de tweede term:

$$-\int_R dx dy \partial_y f_1 = -\int_a^b dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy \partial_y f_1 = \oint_{\mathcal{C}^+} dx f_1(x, y). \tag{4.4.106}$$

Zo vinden we uiteindelijk:

$$\int_R dx dy (\partial_x f_2 - \partial_y f_1) = \oint_{\mathcal{C}^+} (dx f_1 + dy f_2) = \oint_{\mathcal{C}^+} d\vec{x} \cdot \vec{F}, \tag{4.4.107}$$

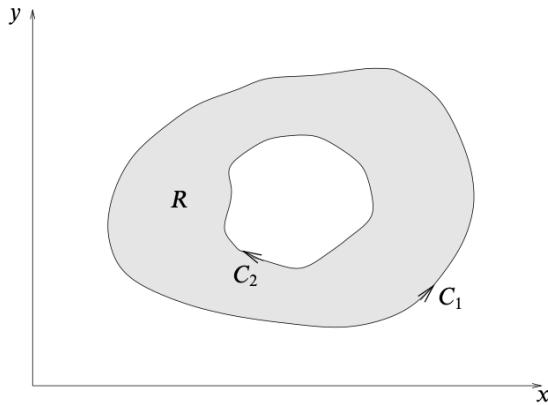
waarmee de stelling van Green voor een normaalgebied bewezen is. Een algemeen samenhangend gebied kunnen we verder opsplitsen in verschillende normaalgebieden. Na toepassing van (4.4.107) op elk normaaldeelgebied, en na het opheffen van de lijnintegralen in tegengestelde zin langs de verschillende randen tussen deze deelgebieden, ($\int_{\mathcal{C}} \vec{F} \cdot d\vec{x} = -\int_{\tilde{\mathcal{C}}} \vec{F} \cdot d\vec{x}$ voor $\tilde{\mathcal{C}}$ de kromme \mathcal{C} doorlopen in tegengestelde richting), vinden we uiteindelijk dezelfde stelling van Green (4.4.107) voor het totale gebied. Hierbij heeft men dan per rand \mathcal{C}_i een kringintegraal met *positieve zin*, waarbij 'positief' nu een tegengestelde draaizin betekent voor buitenranden en binnenranden (zie figuur 4.4).

We kunnen de stelling van Green ook een 3D interpretatie geven: definiëren we een vectorveld $\vec{F} = (f_1, f_2, f_3)$ dan laat deze zich voor een oppervlakteintegraal over een vlak oppervlak S ingebed in \mathbb{R}^3 herschrijven als (ga dit zelf na!):

$$\int_S d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \oint_{\mathcal{C}^+} \vec{F} \cdot d\vec{x}. \tag{4.4.108}$$

Door dit resultaat te gebruiken voor een infinitesimaal oppervlak kunnen we het uitbreiden naar algemene gekromde oppervlakken. Voor een infinitesimaal oppervlak met normaalvector \vec{n} wordt (4.4.108):

$$\Delta A \vec{n} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \oint_{\mathcal{C}^+} \vec{F} \cdot d\vec{x}, \tag{4.4.109}$$



Figuur 4.4: Een meervoudig samengehangen gebied, met voor de twee randen de 'positieve' draaizin die verschijnt bij het toepassen van de stelling van Green (4.4.107). (Voor elk van de randen komt de draaizin overeen met de wandelrichting van een denkbeeldige wandelaar die binnen het gebied R de rand volgt, met telkens de rand rechts van de wandelaar.)

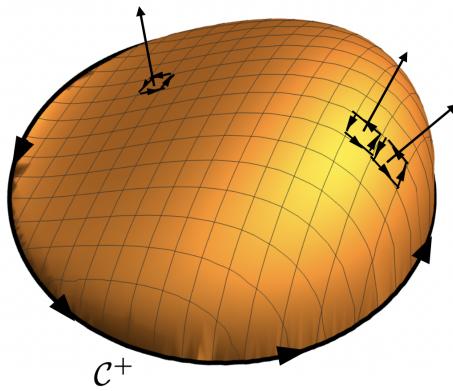
met ΔA de infinitesimale oppervlakte en waarbij de kringintegraal in het rechterlid loopt rond het infinitesimale oppervlak in kwestie, in positieve zin rond \vec{n} . Sommeren we deze vergelijking nu over een algemeen gekromd (!) oppervlak S in \mathbb{R}^3 , dan komt dit voor het linkerlid neer op een Riemann-integratie. Gebruiken we bovendien opnieuw voor het rechterlid dat de lijnintegralen in tegengestelde zin elkaar opheffen, dan vinden we uiteindelijk de **stelling van Stokes** voor algemene continu afleidbare vectorvelden geïntegreerd over algemene gladde oppervlakken:

$$\boxed{\int_S d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \oint_{C^+} \vec{F} \cdot d\vec{x}}, \quad (4.4.110)$$

waarbij de kringintegraal(en) in positieve zin lopen over de rand(en) van het oppervlak, georiënteerd t.o.v. de richting van \vec{n} . Bemerkt dus dat voor verschillende oppervlakken met dezelfde rand, de oppervlakteintegraal hetzelfde resultaat geeft. (Bemerkt ook dat deze vergelijking exact dezelfde vorm heeft als (4.4.108) die we initieel enkel voor vlakke oppervlakken opschreven.)

Kort bewijs

Voor het verkorte (en iets minder rigoreuze) rechtstreekse bewijs van de stelling van Stokes, bewijzen we de stelling van Stokes eerst voor een infinitesimaal oppervlak ΔS dat we zonder verlies van algemeenheid in het XY -vlak leggen. Voor dit infinitesimaal



Figuur 4.5: Een oppervlak S met rand \mathcal{C} , opgedeeld in infinitesimale oppervlakjes, met elk hun normaalvector.

oppervlak krijgen we, startend bij het linkerlid van de stelling van Stokes (4.4.110):

$$\begin{aligned}
 \int_{\Delta S} d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) &= dx dy (\vec{\nabla} \times \vec{F})_z \\
 &= dx dy (\partial_x F_y - \partial_y F_x) \\
 &= dx dy \left(\frac{F_y(x+dx, y, z) - F_y(x, y, z)}{dx} - \frac{F_x(x, y+dy, z) - F_x(x, y, z)}{dy} \right) \\
 &= dy (F_y(x+dx, y, z) - F_y(x, y, z)) + dx (F_x(x, y, z) - F_x(x, y+dy, z)) \\
 &= \oint_{\mathcal{C}^+} \vec{F} \cdot d\vec{x},
 \end{aligned} \tag{4.4.111}$$

waarbij we in de laatste gelijkheid de kring-integraal met positieve oriëntatie (=tegenwijzerzin) langs de rand van het infinitesimale oppervlak ΔS terugvinden. Hiermee is Stokes bewezen voor infinitesimale oppervlakjes.

Het bewijs van de stelling van Stokes voor een algemeen oppervlak S , volgt dan simpelweg door toepassing op al de infinitesimale oppervlakjes ΔS_k die samen het oppervlak S vormen (zie figuur 4.5). Bij het samennemen van twee oppervlakjes, heffen in het rechterlid van de stelling van Stokes de lijnintegralen langs de gemeenschappelijke rand elkaar op doordat de zin tegengesteld is. Uitgebreid naar het totale oppervlak blijft uiteindelijk de kringintegraal (in positieve zin) langs de rand \mathcal{C} over:

$$\int_S d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \sum_k \int_{\Delta S_k} d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{F}) = \oint_{\mathcal{C}^+} \vec{F} \cdot d\vec{x}. \tag{4.4.112}$$

(Bemerkt hier ook nog eens dat de stelling van Green (4.4.104) niets anders is dan een speciaal geval van Stokes, waarbij we het totale oppervlak S volledig in het XY -vlak leggen.)

Voorbeeld. We verifiëren hier de stelling van Stokes voor een specifiek voorbeeld. Als oppervlakken S_1 en S_2 nemen we enerzijds het cirkeloppervlak $\{z = 0, x^2 + y^2 < R^2\}$ en anderzijds de halve bolschil $\{z > 0, x^2 + y^2 + z^2 = R^2\}$. Beide oppervlakken hebben de cirkel $\mathcal{C} = \{z = 0, x^2 + y^2 = R^2\}$ als gemeenschappelijk rand. Bereken nu voor het vectorveld $\vec{A} = (z^3, x^3, y^3)$ de oppervlakteintegraal in het linkerlid van (4.4.110) voor zowel S_1 als S_2 , en verifieer dan de gelijkheid door de berekening van de corresponderende lijnintegraal langs \mathcal{C} .

Oplossing: We berekenen eerst de rotor:

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = 3(y^2, z^2, x^2). \quad (4.4.113)$$

Vervolgens berekenen we de integraal over het cirkeloppervlak S_1 in poolcoördinaten (ρ, θ) (de normaalvector $\vec{n} = (0, 0, 1)$):

$$\begin{aligned} \int_{S_1} d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) &= \int_0^R \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\theta (0, 0, 1) \cdot (3\rho^2 \sin^2 \theta, 0, 3\rho^2 \cos^2 \theta) \\ &= \int_0^R 3\rho^3 d\rho \int_0^{2\pi} d\theta \cos^2 \theta \\ &= \frac{3}{4}\pi R^4. \end{aligned} \quad (4.4.114)$$

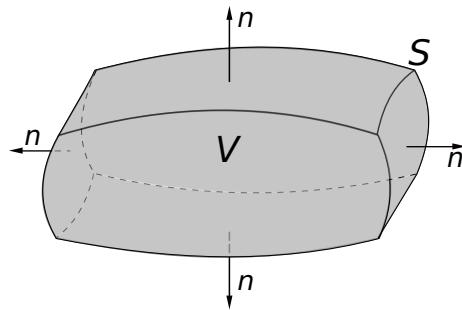
Voor de integraal over de bolschil S_2 krijgen we in bolcoördinaten (θ, φ) gebruik makend van (4.3.102):

$$\begin{aligned} \int_{S_2} d\vec{\sigma} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{A}) &= \\ \int_0^\pi R^2 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi &3R^2 (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta) \cdot (\sin^2 \theta \sin^2 \varphi, \cos^2 \theta, \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) \\ &= \int_0^\pi 3R^4 \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi (\sin^3 \theta \cos \varphi \sin^2 \varphi + \sin \theta \sin \varphi \cos^2 \theta + \cos \theta \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) \\ &= \frac{3}{4}\pi R^4 \end{aligned} \quad (4.4.115)$$

Tot slot, voor de kringintegraal rekenen we uit (gebruik makend van de angulaire poolcoördinaat θ , waarvoor $d\vec{x}/d\theta = (-R \sin \theta, R \cos \theta, 0)$):

$$\begin{aligned} \oint_{\mathcal{C}^+} \vec{A} \cdot d\vec{x} &= \int_0^{2\pi} d\theta (0, R^3 \cos^3 \theta, R^3 \sin^3 \theta) \cdot (-R \sin \theta, R \cos \theta, 0) \\ &= R^4 \int_0^{2\pi} d\theta \cos^4 \theta \\ &= \frac{3}{4}\pi R^4. \end{aligned} \quad (4.4.116)$$

Toepassing. De stelling van Stokes komt veelvuldig van pas bij de studie van elektromagnetisme met haar vergelijkingen die expliciet rotors bevatten van zowel het



Figuur 4.6: Een compact volume V met bijhorend randoppervlak $S = \partial V$ en uitwaarts wijzende normaalvectoren \vec{n} zoals deze verschijnen in de divergentiestelling (4.4.118)

elektrisch als magnetisch veld. Zo vinden we bijvoorbeeld onmiddellijk uit de vergelijking van Faraday (4.2.21) een uitdrukking voor de door een bewegende magneet gegenereerde spanning in een stroomkring (=EMF):

$$EMF = \oint_C \vec{E} \cdot d\vec{x} = - \int_S d\vec{\sigma} \cdot \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = - \frac{d\Phi}{dt}, \quad (4.4.117)$$

met Φ de magnetische flux doorheen het oppervlak dat door de stroomkring wordt omspannen.

4.4.2 Stelling van Gauss

De stelling van Gauss, ook nog **de divergentiestelling**, verbindt de integraal van de divergentie van een continu differentieerbaar vectorveld \vec{F} over een compact volume V met een oppervlakteintegraal over de rand ∂V van het volume:

$$\boxed{\int_V dV \nabla \cdot \vec{F} = \int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F} = \int_{\partial V} d\sigma \vec{n}^u \cdot \vec{F}}, \quad (4.4.118)$$

waarbij het superscript bij de normaal-eenheidsvector \vec{n}^u , betekent dat deze uitwendig gericht moet worden genomen (zie figuur 4.6).

Omstandig bewijs

We bewijzen deze stelling eerst voor een normaalgebied $V \in \mathbb{R}^3$. Als veralgemening van een normaalgebied $R \in \mathbb{R}^2$ (zie de vorige subsectie) hebben we voor een 3D normaalgebied dat dit zowel XY -, YZ -, als XZ -projecteerbaar is. Voor een XY -projecteerbaar gebied hebben we dat elke rechte orthogonaal op het XY -vlak (dus in de Z -richting) dat door het gebied V gaat, de rand ∂V in twee punten $z_1(x, y)$ en $z_2(x, y)$ snijdt. YZ - en XZ - projecteerbaarheid worden analoog gedefinieerd.

In componenten uitgeschreven leest de stelling van Gauss (met $\vec{F} = (f_1, f_2, f_3)$ en $\vec{n}^u = (n_1^u, n_2^u, n_3^u)$):

$$\sum_i \int_V dV \partial_{x_i} f_i = \sum_i \int_{\partial V} d\sigma f_i n_i^u \quad (4.4.119)$$

De stelling is dan bewezen als we de gelijkheid voor elke i -component afzonderlijk bewijzen. Voor $i = 3$ moeten we dan bewijzen:

$$\int_V dV \partial_z f_3 = \int_{\partial V} d\sigma f_3 n_3^u. \quad (4.4.120)$$

We maken hiervoor gebruik van de XY -projecteerbaarheid, waarbij we het volume V projecteren op het XY -vlak, met projectie V_{xy} :

$$\int_V dV \partial_z f_3 = \int_{V_{xy}} dx dy \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} \partial_z f_3 = \int_{V_{xy}} dx dy (f_3(x, y, z_2(x, y)) - f_3(x, y, z_1(x, y))) \quad (4.4.121)$$

Het randoppervlak ∂V valt uiteen in een bovendeel ∂V_2 en onderdeel ∂V_1 . (Voor een eventueel 'zijdeel' parallel met de Z -as hebben we dat $n_3 = 0$ zodat dit deel niet bijdraagt aan de oppervlakte-integraal in (4.4.120)). Voor de (x, y) -parametrisatie van het bovendeel van het randoppervlak hebben we:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial x} = (1, 0, \partial_x z_2) \quad \frac{\partial \vec{r}}{\partial y} = (0, 1, \partial_y z_2), \quad (4.4.122)$$

waaruit

$$\begin{aligned} d\vec{\sigma} = \vec{n} d\sigma &= (\partial_x \vec{r} \times \partial_y \vec{r}) dx dy \\ &= (-\partial_x z_2, -\partial_y z_2, 1) dx dy \\ &= \frac{(-\partial_x z_2, -\partial_y z_2, 1)}{((\partial_x z_2)^2 + (\partial_y z_2)^2 + 1)^{1/2}} ((\partial_x z_2)^2 + (\partial_y z_2)^2 + 1)^{1/2} dx dy, \end{aligned} \quad (4.4.123)$$

waaruit we expliciet \vec{n} en $d\sigma$ kunnen aflezen. Bemerk dat de z -component van \vec{n} hier positief is, zodat deze inderdaad naar buiten wijst. Hieruit zien we dan dat:

$$\int_{V_{xy}} dx dy f_3(x, y, z_2(x, y)) = \int_{\partial V_2} d\sigma n_3^u f_3, \quad (4.4.124)$$

zich inderdaad herleidt tot de oppervlakteintegraal van (4.4.120), over het bovendeel van het randoppervlak. Analoog vinden we dat de tweede term in (4.4.121) zich herleidt tot de correcte oppervlakteintegraal over het onderdeel. Hiermee is (4.4.120) bewezen. Het bewijs voor de $i = 1, 2$ componenten is volledig analoog, zodat hiermee uiteindelijk de stelling van Gauss voor algemene normaalgebieden bewezen is.

Dit bewijs kan makkelijk worden uitgebreid naar meer algemene niet-normaal gebieden V die kunnen worden opgesplitst in verschillende normaaldeelgebieden. Hiertoe gebruiken we de divergentiestelling voor elk normaaldeelgebied. Voor door verschillende deelgebieden gedeelde randen wijzen de uitwendige normaalvectoren in tegengestelde richting, waardoor de oppervlakteintegralen daar wegvalLEN. Wat dan overblijft is de netto oppervlakteintegraal langs het randoppervlak ∂V van het volledige gebied, in overeenstemming met Gauss (4.4.118).

Kort bewijs

Voor het verkorte bewijs van de stelling van Gauss, bewijzen we analoog als bij de stelling van Stokes eerst een infinitesimale versie, waarbij we een infinitesimaal kubisch volume ΔV beschouwen, met de assen gelegen volgens X, Y, Z . Vertrekkende van het linkerlid van de stelling van Gauss (4.4.118) krijgen we dan:

$$\begin{aligned}
 \int_{\Delta V} dV \vec{\nabla} \cdot \vec{F} &= dx dy dz (\partial_x f_1 + \partial_y f_2 + \partial_z f_3) \\
 &= dx dy dz \left(\frac{f_1(x+dx, y, z) - f_1(x, y, z)}{dx} + \frac{f_2(x, y+dy, z) - f_2(x, y, z)}{dy} + \right. \\
 &\quad \left. \frac{f_3(x, y, z+dz) - f_3(x, y, z)}{dz} \right) \\
 &= dy dz (f_1(x+dx, y, z) - f_1(x, y, z)) + dx dz (f_2(x, y+dy, z) - f_2(x, y, z)) \\
 &\quad + dx dy (f_3(x, y, z+dz) - f_3(x, y, z)) \\
 &= \int_{\Delta S} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F},
 \end{aligned} \tag{4.4.125}$$

waarbij we in de laatste gelijkheid de oppervlakteintegraal terugvinden over het randoppervlak ΔS van ons beschouwde infinitesimaal volume ΔV , waarbij de normaalvectoren naar buiten wijzen (zie fig. 4.7). Hiermee is de stelling van Gauss bewezen voor infinitesimale volumes.

Het bewijs voor een algemeen volume V volgt (opnieuw analoog als bij Stokes) dan door dit volume op te delen in infinitesimale volumes ΔV_k . Nemen we twee naburige volumes samen, dan zal in de oppervlakteintegraal de bijdrage langs de gemeenschappelijke rand wegvalLEN. Uitgebreid naar het totale volume blijft dan de oppervlakteintegraal over langs het randoppervlak ∂V van V :

$$\int_V dV \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \sum_k \int_{\Delta V_k} dV \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F} \tag{4.4.126}$$

waarmee de stelling van Gauss bewezen is.

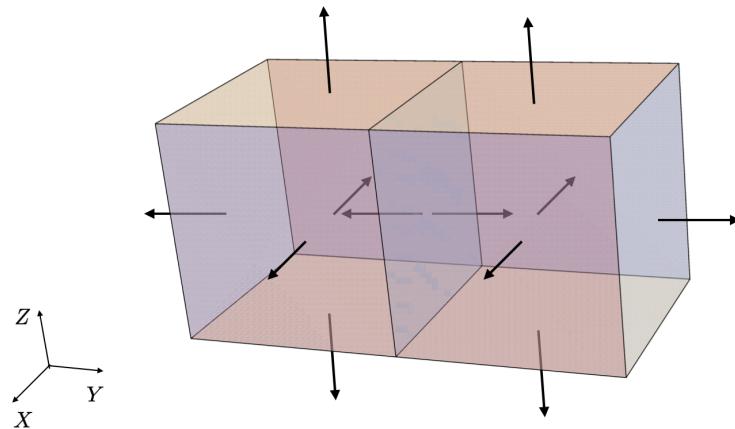
Voorbeeld. Verifieer de stelling van Gauss voor het vectorveld $\vec{F} = (x, y, z)$, geïntegreerd over de bol met straal R : $V = \{x^2 + y^2 + z^2 < R^2\}$.

Oplossing: We werken hiervoor in bolcoördinaten. Voor de volume-integraal vinden we:

$$\int_V dV \vec{\nabla} \cdot \vec{F} = \int_0^R r^2 dr \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi 3 = 4\pi R^3. \tag{4.4.127}$$

Voor de oppervlakte-integraal vinden we (gebruik makend van (4.3.102)) en $\vec{F} = (x, y, z) = R\vec{n}$:

$$\int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{F} = R^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi R = 4\pi R^3. \tag{4.4.128}$$



Figuur 4.7: Twee infinitesimale kubussen, waarvoor we in (4.4.125) de stelling van Gauss bewijzen, waarbij we voor elke kubus de oppervlakte-integraal terugvinden met de normaalvector naar buiten wijzend. Bij het samennemen van de bijdrage van de twee kubussen valt de oppervlakte-integraal langs het gemeenschappelijke XZ -vlak dan weg doordat de respectievelijke normaalvectoren tegengesteld zijn.

4.4.3 Toepassing: continuïteitsvergelijking

Een belangrijk gevolg van de stelling van Gauss is dat we hiermee *globale* behoudswetten kunnen vertalen naar *lokale* continuïteitsvergelijkingen. Neem een bepaalde substantie die kan stromen, waardoor een 'lading' Q zich kan verplaatsen (elektrische lading in een elektronenstroom, deeltjesaantal in een diffusieproces, warmte bij warmtegeleiding, massa die zich verplaatst in een vloeistof,...). De stroming drukken we uit via de stroomdichtheid \vec{j} , waarvoor we hebben dat de totale lading die per tijdseenheid door een bepaald oppervlak S stroomt gelijk is aan (zie ook de toepassing op het einde van § 4.3.2):

$$I = \frac{dQ}{dt} = \int_S d\vec{\sigma} \cdot \vec{j} \quad (4.4.129)$$

Beschouwen we nu de lading Q in een bepaald compact volume V dan hebben we dat, aangezien de totale lading Q_{tot} behouden is, de afname/toename van Q volledig te wijten is aan ladingsstroom door de rand van V . Schrijven we verder $Q(t)$ als $\int_V dV \rho(\vec{x}, t)$, met $\rho(\vec{x}, t)$ de ladingsdichtheid, dan vinden we zo:

$$\frac{dQ}{dt} = \int_V dV \frac{\partial \rho}{\partial t} = - \int_{\partial V} d\vec{\sigma} \cdot \vec{j}, \quad (4.4.130)$$

waarbij we de normaalvector voor de oppervlakte-integraal naar buiten wijzend nemen, zodat deze integraal inderdaad de snelheid geeft waarmee de lading Q uit het gebied V stroomt. Via de stelling van Gauss kunnen we dit nog schrijven als:

$$\int_V dV \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} \right) = 0. \quad (4.4.131)$$

Aangezien deze gelijkheid moet gelden voor elk mogelijk volume V , moet het integrandum zelf verdwijnen:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = 0, \quad (4.4.132)$$

dit is precies **de lokale continuïteitsvergelijking** die volgt uit het globale behoud van lading.

Opmerking: Beschouw nu het stationaire regime voor een geleider waardoor lading stroomt. In dit regime is $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$, zodat de stroomdichtheid \vec{j} divergentievrij is. Op dat moment is de flux door elk (vlak, gekromd) oppervlak dat deze geleider doorsnijdt gelijk. Anders zou immers de lading binnen een volume begrensd door twee oppervlakken niet constant zijn. Dit is bijvoorbeeld het geval voor de laminaire stroom die we op het einde van § 4.3.2 als oefening geven.

Toepassingen. Laat ons hier tot slot nog kort enkele toepassingen van de continuïteitvergelijking (4.4.132) doorlopen.

- Behoud elektrische lading: ρ en \vec{j} in de wetten van Maxwell ((4.2.19),(4.2.22)) voldoen precies aan de continuïteitvergelijking.
- Behoud massa: In een vloeistof/gas geeft $\vec{j} = \rho \vec{v}$ de stroomdichtheid voor de stroom van massa, waarbij nu ρ slaat op de massadichtheid en \vec{v} op het snelheidsveld. Zie ook de expliciete continuïteitvergelijking (4.2.23) die we bij het begin van dit hoofdstuk neerschreven.
- De warmtevergelijking (behoud warmte-energie): Ook voor een warmtegeleider hebben we de continuïteitvergelijking (4.4.132), waarbij ρ dan staat voor de warmtedichtheid. Voor de warmtestroom \vec{j} hebben we dan de wet van Fourier:

$$\vec{j} = -\lambda \vec{\nabla} T(\vec{x}) \quad (4.4.133)$$

met $T(\vec{x})$ de plaatsafhankelijke temperatuur en λ een coëfficient die we in veel gevallen als constant kunnen nemen. Verder kunnen we $\dot{\rho}$ ook nog uitdrukken via de specifieke warmtecapaciteit c :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = c \rho_m \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4.4.134)$$

waarbij ρ_m de massadichtheid is. Nemen we ρ_m en c constant dan herleidt de continuïteitvergelijking (4.4.132) zich zo tot de **warmtevergelijking** die de temperatuursevolutie $T(\vec{x}, t)$ doorheen een warmtegeleider beschrijft, en die we verder in hoofdstuk 7 zullen bestuderen:

$$\partial_t T = \alpha \Delta T, \quad (4.4.135)$$

met α een positieve constante.

- Diffusie (behoud aantal deeltjes): voor een diffusieproces schrijven we $\rho = n$, de deeltjesdichtheid, en hebben we voor de deeltjesstroom \vec{j} de wet van Fick:

$$\vec{j} = -D\vec{\nabla}n, \quad (4.4.136)$$

waardoor de continuïteitvergelijking (4.4.132) zich herleidt tot een vergelijking van dezelfde vorm als (7.1.1) met $T \rightarrow n$.

Hoofdstuk 5

Gewone lineaire differentiaalvergelijkingen

5.1 Definities en de gereduceerde lineaire DV

De standaardgedaante van een gewone lineaire differentiaalvergelijking (DV) van de n -de orde in een interval $]a, b[$ is

$$y^{(n)}(x) + p_1(x)y^{(n-1)}(x) + \dots + p_n(x)y = g(x) \quad (5.1.1)$$

waarbij de gegeven functies g, p_1, \dots, p_n continu in $]a, b[$ worden ondersteld. Merk op dat in deze standaardgedaante de coëfficiënt van de hoogste orde afgeleide van de onbekende functie $y(x)$ gelijk aan 1 is gesteld. **'Gewoon:'** we beschouwen hier functies $y(x)$ van één variabele x . **'Lineair:'** de functie $y(x)$ en haar afgeleiden komen enkel lineair voor in de vergelijking.

Noteren we afleiding naar x als D en voeren we **de afleidingsoperator** $L(D)$ in d.m.v.

$$L(D) = D^n + p_1(x)D^{n-1} + \dots + p_{n-1}(x)D + p_n(x) \quad (5.1.2)$$

dan kan de lineaire DV eenvoudig geschreven worden als:

$$L(D)y = g(x) \text{ in }]a, b[\quad (5.1.3)$$

Door het rechterlid van deze vergelijking nul te stellen, bekomt men de zogenaamde **gereduceerde vergelijking** (ook nog: **homogene vergelijking**):

$$L(D)y = 0 \text{ in }]a, b[. \quad (5.1.4)$$

Een oplossing van de gereduceerde vergelijking (5.1.4) wordt **een homogene oplossing** genoemd. Ter onderscheid spreekt men ook nog van de **complete vergelijking** als men de originele DV bedoelt.

Voor de lineaire DV is de afleidingsoperator $L(D)$ een **lineaire operator**: er geldt voor algemene functies f en g die voldoende afleidbaar in $]a, b[$ zijn, en constanten α en β dat:

$$L(D)(\alpha f + \beta g) = \alpha L(D)f + \beta L(D)g. \quad (5.1.5)$$

Hieruit volgt meteen een eerste, fundamentele, eigenschap van lineaire DVn: elke lineaire combinatie van homogene oplossingen van de gereduceerde DV is weerom een oplossing van de gereduceerde DV. De **oplossingsruimte van de gereduceerde DV is** met andere woorden **een vectorruimte** (zie hoofdstuk 2 § 2.1.1). Het blijkt nu (we bewijzen dit hier niet) dat voor een n -orde lineaire DV, de dimensie van de bijhorende oplossingsruimte V_L van het homogeen (gereduceerd) probleem precies n is. De meest algemene oplossing van het gereduceerd probleem kan dus geschreven worden als een unieke lineaire combinatie van n basisoplossingen:

$$\begin{aligned} V_L &= \text{span}\{y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)\} \\ L(D)y = 0 &\Leftrightarrow y \in V_L \Leftrightarrow y(x) = C_1 y_1(x) + \dots + C_n y_n(x). \end{aligned} \quad (5.1.6)$$

Voorbeeld:

1- Voor $y' - \lambda y = 0$ (zie hoofdstuk 1 § 1.3), hebben we $L(D) = D - \lambda$. De algemene oplossing leest: $y = C_1 e^{\lambda x}$, de oplossingsruimte V_L is hier dus 1-dimensionaal.

2- Voor $y'' + \omega^2 y = 0$, hebben we $L(D) = D^2 + \omega^2$. De algemene oplossing leest: $y = C_1 \cos \omega x + C_2 \sin \omega x$, de oplossingsruimte V_L is hier dus 2-dimensionaal.

Stel, je hebt n oplossingen gevonden voor een n -de orde homogene vergelijking. Hoe weet je dat deze lineaire onafhankelijk zijn, hoe weet je met andere woorden dat deze een basis vormen voor de volledige oplossingsruimte V_L ? Hiervoor komt de zogenaamde **Wronskiaan** van pas:

De oplossingen y_1, \dots, y_n van de gereduceerde lineaire DV

$$L(D)y = 0, \quad x \in]a, b[\quad (5.1.7)$$

zijn lineair onafhankelijk als en slechts als de determinant van de *wronskiaanse matrix* (kortweg *wronskiaan*)

$$W(y_1, \dots, y_n) := \det \begin{vmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_n \\ y'_1 & y'_2 & \cdots & y'_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_1^{(n-1)} & y_2^{(n-1)} & \cdots & y_n^{(n-1)} \end{vmatrix} \quad (5.1.8)$$

verschillend van nul is. Als **theoretische oefening** kan je gebruik makende van de eigenschappen van de determinant (zie § 2.3.1) zelf aantonen dat de Wronskiaan constant is (i.e. $W'(x) = 0$) in het interval $]a, b[$ waarvoor (5.1.4) geldt. Met andere woorden wanneer $W \neq 0$ voor één punt in het interval $]a, b[$, dan geldt dit voor elk ander punt.

Voorbeeld: Bereken de Wronskiaan $W(y_1, y_2)$ voor de oplossingen $y_1 = \cos \omega x$ en $y_2 = \sin \omega x$ van de homogene 2-de orde vergelijking $y'' + \omega^2 y = 0$.

Oplossing:

We vinden onmiddellijk:

$$W(y_1, y_2) = \begin{vmatrix} \cos \omega x & \sin \omega x \\ -\omega \sin x & \omega \cos x \end{vmatrix} = \omega, \quad (5.1.9)$$

deze oplossingen zijn dus lineair onafhankelijk, wat we hier uiteraard ook op het zicht konden zien.

Het bepalen van n basisoplossingen voor een gereduceerde lineaire DV is meestal alles behalve een triviaal probleem. Voor algemene coëfficiëntsfuncties $p_i(x)$ in (5.1.2) is het niet mogelijk om analytische uitdrukkingen te vinden. Desalniettemin, in vele gevallen zijn er wel uitdrukkingen bekend, die zich laten schrijven in termen van gekende analytische functies (dikwijls zijn dit 'speciale functies'). In dergelijke gevallen kan je deze analytische basisoplossingen bijvoorbeeld met behulp van Maple bekomen, via het dsolve commando. We geven hieronder twee bijzondere gevallen waar je ook met pen-en-papier nog aankan.

A. Lineaire DV van de 1ste orde:

$$y' + p_1(x)y = 0 \quad \text{in }]a, b[. \quad (5.1.10)$$

Een basisoplossing wordt gegeven door:

$$y(x) = \exp(-P_1(x)) \quad \text{met } P'_1 = p_1 \quad \rightarrow \quad P_1 = \int_{x_0}^x dx' p_1(x') \quad (5.1.11)$$

B. Lineaire DV met constante coëfficiënten:

$$L(D) = D^n + a_1 D^{n-1} + \dots + a_{n-1} D + a_n \quad (5.1.12)$$

waarbij $a_1, a_2, \dots, a_n \in \mathbb{R}$ of \mathbb{C} . Om hiervoor de basisoplossingen te vinden hebben we de zogenaamde karakteristieke veelterm $L(z)$ nodig. Deze vinden we door in (5.1.12) D door een complexe variabele z te vervangen:

$$L(z) = z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_{n-1} z + a_n. \quad (5.1.13)$$

De basisoplossingen worden dan bepaald door de wortels α_i van $L(z) = 0$:

$$L(z) = z^n + a_1 z^{n-1} + \dots + a_{n-1} z + a_n = (z - \alpha_1)^{m_1} \dots (z - \alpha_p)^{m_p} \quad (5.1.14)$$

waarbij de som van de multipliciteiten:

$$m_1 + m_2 + \dots + m_p = n. \quad (5.1.15)$$

Met elke wortel α_j met multipliciteit m_j , $j = 1, \dots, p$, corresponderen m_j basisoplossingen gegeven door

$$\exp(\alpha_j x) x^k, \quad k = 0, 1, \dots, m_j - 1 \quad (5.1.16)$$

(controleer dit!)¹ Merk op dat als een wortel α van $L(z)$ complex is, en de coëfficiënten a_1, a_2, \dots, a_n reëel, dan ook de complex toegevoegde $\bar{\alpha}$ een wortel is. De corresponderende basisoplossingen kunnen dan ook geschreven worden met behulp van de circulaire functies cos en sin.

Voorbeeld: Bepaal handmatig twee reële basisoplossingen voor de lineaire DV

$$y'' + y' + y = 0 \quad \text{in }]-\infty, +\infty[\quad (5.1.17)$$

Oplossing:

De geassocieerde veelterm in z luidt:

$$z^2 + z + 1 \quad (5.1.18)$$

of, ontbonden in factoren over \mathbb{C} :

$$\left(z + \frac{1}{2} + i\frac{\sqrt{3}}{2} \right) \left(z + \frac{1}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2} \right). \quad (5.1.19)$$

Basisoplossingen in zijn dus

$$\exp\left(-\frac{1}{2}x - i\frac{\sqrt{3}}{2}x\right) \text{ en } \exp\left(-\frac{1}{2}x + i\frac{\sqrt{3}}{2}x\right). \quad (5.1.20)$$

Merk op dat de coëfficiënten in de karakteristieke veelterm reëel zijn en dat de complexe wortels dus elkaar toegevoegde zijn. De vermelde basisoplossingen kunnen dan worden gecombineerd tot de alternatieve reële basis:

$$\exp\left(-\frac{1}{2}x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x\right) \text{ en } \exp\left(-\frac{1}{2}x\right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}x\right). \quad (5.1.21)$$

5.2 De complete lineaire DV

Beschouw een complete lineaire DV:

$$L(D)y = g(x), \quad x \in]a, b[\quad (5.2.22)$$

met dus nu een functie $g(x)$ in het rechterlid die verschillend van nul kan zijn. Stel dat men beschikt over één specifieke oplossing - men zegt doorgaans **particuliere oplossing** $\tilde{y}(x)$ ervan:

$$L(D)\tilde{y}(x) \equiv g(x), \quad x \in]a, b[. \quad (5.2.23)$$

¹Je kan deze uitdrukking voor de oplossingen het makkelijkst controleren door deze rechtstreeks in $L(D)y = 0$ te substitueren (met $L(D)$ gegeven door (5.1.12)). Ze kan ook in principe worden afgeleid uit de matrixvorm $\mathbf{y}' = \mathbf{Ay}$, met $\mathbf{y} = (y^{(n-1)}(x), y^{(n-2)}(x), \dots, y(x))$, zie hoofdstuk 2 § 2.3.5.

Voor elke andere oplossing y van de complete vergelijking geldt dan in $]a, b[$:

$$\begin{aligned} L(D)(y - \tilde{y}) &= L(D)y - L(D)\tilde{y} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (5.2.24)$$

m.a.w. $y - \tilde{y}$ is oplossing van de gereduceerde lineaire DV. Hieruit volgt dat de algemene oplossing van de complete lineaire DV $L(D)y = g$, gelijk is aan de algemene oplossing van de gereduceerde DV plus één particuliere oplossing van de complete DV:

$$y(x) = y_p(x) + \sum_{i=1}^n C_i y_i(x). \quad (5.2.25)$$

Zoals we in hoofdstuk 2 reeds aanhaalden is dit identiek als bij de oplossingen van lineaire matrixstelsels $\mathbf{Ay} = \mathbf{b}$, waarbij een algemene oplossing kan worden geschreven als, $\mathbf{y} = \mathbf{y}_p + \mathbf{y}_0$, de som van één particuliere oplossing \mathbf{y}_p en een algemene vector \mathbf{y}_0 in de nulruimte (i.e. oplossing van $\mathbf{Ay} = \mathbf{0}$).

Voorbeeld:

Beschouw de lineaire DV

$$y'' + 4y = 3 \cos 2x, \quad x \in]-\infty, +\infty[. \quad (5.2.26)$$

Controleer dat een particuliere oplossing wordt gegeven door:

$$\tilde{y}(x) = \frac{3}{4}x \sin 2x. \quad (5.2.27)$$

Bepaal ook de meest algemene oplossing.

Oplossing: Gegeven de particuliere oplossing $\tilde{y}(x)$, en de homogene oplossingen van $y'' + 4y = 0$ vinden we makkelijk de uitdrukking voor de meest algemeen oplossing:

$$y(x) = C_1 \cos 2x + C_2 \sin 2x + \frac{3}{4}x \sin 2x \quad (5.2.28)$$

5.2.1 Beginvoorwaardenprobleem

Een typisch modelleringsprobleem waar differentiaalvergelijkingen bij te pas komen valt uiteen in: 1) het opstellen van de DV die het proces in kwestie beschrijft en 2) het bepalen van de oplossing die hoort bij de **beginvoorwaarden** of **randvoorwaarden**. Bij beginvoorwaarden gaat het over verschillende voorwaarden die we opleggen aan $y(x)$ voor eenzelfde initiële $x = x_0$, bijvoorbeeld de initiële positie $y(x_0)$ en snelheid $y'(x_0)$ van een deeltje. De variabele x speelt voor dergelijke problemen typisch de rol van tijd en we zullen voor dergelijke problemen dan ook t gebruiken i.p.v. x .

Het algemene beginvoorwaardenprobleem bestaat dan uit de n -de orde lineaire DV:

$$L(D)y = g(t), \quad t \in]a, b[\quad (5.2.29)$$

gekoppeld aan de beginvoorwaarden

$$\begin{cases} y(t_0) &= y_0 \\ y'(t_0) &= y_1 \\ \vdots & \\ y^{(n-1)}(t_0) &= y_{n-1} \end{cases}, \quad t_0 \in]a, b[\quad (5.2.30)$$

waarbij y_0, y_1, \dots, y_{n-1} gegeven getallen zijn. Deze bezit een **unieke oplossing** in $]a, b[$. Hierbij is stilzwijgend ondersteld dat de optredende functies in $L(D)$ en de functie g in het rechterlid, continu in $]a, b[$ zijn.

Bewijs

In het interval in $]a, b[$ bestaan er n lineair onafhankelijke basisoplossingen van de gereduceerde vergelijking: $y_1(t), y_2(t), \dots, y_n(t)$, waarmee de algemene oplossing van de complete DV wordt opgebouwd

$$y(t) = C_1 y_1(t) + \dots + C_n y_n(t) + \tilde{y}(t). \quad t \in]a, b[. \quad (5.2.31)$$

Hierbij is $\tilde{y}(t)$ een particuliere oplossing van de complete DV. Drukken we uit dat de gezochte oplossing van het beginvoorwaardenprobleem aan de beginvoorwaarden moet voldoen, dan komt er:

$$\begin{cases} y_0 &= C_1 y_1(t_0) + \dots + C_n y_n(t_0) + \tilde{y}(t_0) \\ y_1 &= C_1 y'_1(t_0) + \dots + C_n y'_n(t_0) + \tilde{y}'(t_0) \\ \vdots & \\ y_{n-1} &= C_1 y_1^{(n-1)}(t_0) + \dots + C_n y_n^{(n-1)}(t_0) + \tilde{y}^{(n-1)}(t_0). \end{cases} \quad (5.2.32)$$

Dit lineair stelsel in de onbekenden (C_1, \dots, C_n) bezit een unieke oplossing als de determinant van het stelsel verschillend is van nul. De determinant van dit stelsel is precies de functiewaarde van de wronskiaan in het punt $t_0 \in]a, b[$. Aangezien (y_1, \dots, y_n) een basis is voor de oplossingenruimte van de gereduceerde DV is de wronskiaan ervan niet nul in $]a, b[$. Er bestaan dus unieke (C_1^*, \dots, C_n^*) die aan het bovenstaande stelsel voldoen. De functie y^* gegeven door:

$$y^*(t) = C_1^* y_1(t) + \dots + C_n^* y_n(t) + \tilde{y}(t) \quad (5.2.33)$$

is dan de unieke oplossing van het gegeven beginvoorwaardenprobleem in $]a, b[$. \square

Beginvoorwaarden versus randvoorwaarden. We spreken over randvoorwaarden wanneer deze worden gesteld voor verschillende x bvb., $y(a) = y_a$ en $y(b) = y_b$ voor een tweede orde DV (typisch komen deze punten overeen met een fysieke rand zoals de eindpunten van een snaar). Zowel vanuit wiskundig als praktisch oogpunt is er een groot verschil tussen beginvoorwaardenproblemen en randvoorwaardenproblemen. Waar er voor deze eerste klasse, voor 'brave' DVn van de vorm (5.1.1), altijd een unieke oplossing is, is dit niet het geval voor de tweede klasse. Neem bijvoorbeeld de vergelijking $y'' + y = 0$, met als algemene oplossing $y(x) = C_1 \cos x + C_2 \sin x$. Leggen we als randvoorwaarden $y(0) = 0, y(\pi/2) = 1$ op, dan vinden we als unieke oplossing

$y(x) = \sin x$. Voor $y(0) = y(\pi) = 0$ vinden we er oneindig veel: $y(x) = C_2 \sin(x)$. Voor $y(0) = 0, y(\pi) = 1$ bestaat er geen oplossing (zie ook zometeen § ??).

Voorbeeldvraagstuk: Een populatie bacteriën neemt in aantal toe recht evenredig met het aantal aanwezige bacteriën (evenredigheidsfactor a). De aanwezigheid van een toxine veroorzaakt de dood van bacteriën met een snelheid evenredig met het aantal bacteriën en evenredig met de hoeveelheid toxine (evenredigheidsfactor b). Op het beginstip is de populatie bacteriën N_0 en is er geen toxine aanwezig in de voedingsbodem. Van dan af neemt de hoeveelheid toxine toe met constante snelheid c . Bepaal de populatie bacteriën op elk tijdstip $t > 0$ en voor $t \rightarrow \infty$.

Oplossing:

Voor het aantal bacteriën $N(t)$ hebben we volgende vergelijking:

$$N'(t) = aN(t) - bN(t)T(t), \quad (5.2.34)$$

met $T(t)$ de hoeveelheid toxine. Voor $T(t)$ hebben we de vergelijking:

$$T'(t) = c. \quad (5.2.35)$$

De beginvoorwaarden lezen $N(0) = N_0$ en $T(0) = 0$. Uit (5.2.35) en de beginvoorwaarde $T(0) = 0$ vinden we dan meteen: $T(t) = ct$. Na substitutie van $T(t)$ in (5.2.34) vinden we dan een lineaire DV voor $N(t)$ met algemene oplossing:

$$N(t) = C_1 e^{at - \frac{1}{2}bct^2}, \quad (5.2.36)$$

en dus rekening houdend met de beginvoorwaarde, $C_1 = N_0$. Voor $t \rightarrow \infty$ vinden we dan $N(t) \rightarrow 0$.

5.3 Toepassing: de harmonische oscillator/ het RLC circuit

We bestuderen hier de algemene tweede orde lineaire DV met constante coëficiënten:

$$mu'' + \tilde{D}u' + ku = F(t), \quad t \in [0, +\infty[\quad (5.3.37)$$

Dit is een klassieker. Het geeft een prototype van een *resonator*, een oscillerend systeem dat een bepaald resonant gedrag kan vertonen, wanneer het gedreven wordt door een periodieke externe kracht $F(t) \sim \cos \omega t$. Er bestaan resonators in allerlei maten en gewichten, gaande van muziekinstrumenten tot elektrische circuits, van kristallen tot individuele atomen. Voorbeelden van resonators beschreven door (5.3.37) zijn de (verticaal opgehangen) veer, de slinger en het seriegeschakelde RLC circuit. Deze laatste is een elektrisch circuit bestaande uit een weerstand (met weerstand R), een spoel (met zelfinductie L) een condensator (met capaciteit C) en een uitwendig spanning ($E(t)$), bvb. afkomstig van een batterij of omgevingselektrromagnetische straling. Het

112HOOFDSTUK 5. GEWONE LINEAIRE DIFFERENTIAALVERGELIJKINGEN

is een mooie illustratie van het universele karakter van de wiskunde dat deze verschillende systemen worden beschreven door dezelfde vergelijking. In de tabel geven we de interpretatie van de verschillende grootheden voor deze drie systemen.

	veer	slinger	RLC circuit
u	uitwijking veeruiteinde	hoekuitwijking slinger	lading q op condensator
u'	sneldheid veeruiteinde	hoeksnelheid	stroom $I = q'$
m	massa aan veer	lengte slinger	zelfinductie L
\tilde{D}	dempingsfactor	dempingsfactor	weerstand R
k	veerconstante (Hooke)	gravitatieveld g	$1/C$
$F(t)$	uitwendige kracht	uitwendige kracht/massa	uitwendige spanning $E(t)$

We bespreken hier enkele gevallen van (5.3.37). Naast de vergelijking hebben we ook bepaalde beginvoorwaarden. Het begrip **initiële rust**, slaat dan op de beginvoorwaarde waarbij de veer zich bevindt in de rustpositie, met nulsneldheid $u(0) = u'(0) = 0$. Of equivalent voor het RLC circuit, initiële verdwijnde lading q en stroom $I = q'$.

- **1ste geval: geen demping, geen uitwendige kracht**

Het model luidt hier:

$$\begin{cases} u'' + \omega_0^2 u = 0, \\ u(0) = u_0 \\ u'(0) = u_1 \end{cases} \quad (5.3.38)$$

waarbij $\omega_0^2 = \frac{k}{m}$ is gesteld; ω_0 noemt men de *eigenfrequentie* van het systeem.

De unieke oplossing is:

$$u(t) = u_0 \cos \omega_0 t + \frac{u_1}{\omega_0} \sin \omega_0 t, \quad (5.3.39)$$

Merk op dat in geval van initiële rust ($u_0 = u_1 = 0$), er zoals verwacht helemaal geen beweging is. Stelt men nog

$$u_0 = A \cos \varphi, u_1 = \omega_0 A \sin \varphi \quad (5.3.40)$$

dan is de oplossing te schrijven als

$$u(t) = A \cos(\omega_0 t - \varphi) \quad (5.3.41)$$

Men noemt A de *amplitude* en φ de *fase(hoek)* van de immer oscillerende beweging die begrensd blijft.

- **2de geval: geen demping, een oscillerende uitwendige kracht**

Het model luidt hier:

$$\begin{cases} u'' + \omega_0^2 u = a \sin \omega t, \\ u(0) = 0 \\ u'(0) = 0 \end{cases} \quad (5.3.42)$$

mits de veronderstelling van initiële rust. De unieke oplossing is (controleer!)

$$u(t) = \frac{a}{\omega_0^2 - \omega^2} \left(\sin \omega t - \frac{\omega}{\omega_0} \sin \omega_0 t \right), \quad (5.3.43)$$

eveneens een immer oscillende beweging die begrensd blijft. Hierbij is stilzwijgend ondersteld dat de frequentie ω van de oscillende uitwendige kracht verschilt van de eigenfrequentie ω_0 van het veersysteem.

In het geval de beide vermelde frequenties gelijk zijn, is het model, bij initiële rust, gegeven door:

$$\begin{cases} u'' + \omega_0^2 u = a \sin \omega_0 t \\ u(0) = 0 \\ u'(0) = 0 \end{cases} \quad (5.3.44)$$

waarvan de unieke oplossing luidt (je kan deze ook bekomen door in (5.3.43) de limiet $\omega \rightarrow \omega_0$ te nemen):

$$u(t) = \frac{1}{2} \frac{a}{\omega_0^2} (\sin \omega_0 t - \omega_0 t \cos \omega_0 t), \quad t \in [0, +\infty[. \quad (5.3.45)$$

De beweging is wel oscillend maar de amplitude neemt nu onbeperkt toe. Dit onbeperkt resonant gedrag is als dusdanig niet fysisch. Realistische oscillatoren zullen altijd een zekere dempingsfactor D hebben, die de onbeperkte groei counterst.

- **3de geval: wel damping, geen uitwendige kracht**

Het model luidt hier:

$$\begin{cases} u'' + 2\rho u' + \omega_0^2 u = 0, \quad t \in [0, +\infty[\\ u(0) = u_0 \\ u'(0) = u_1 \end{cases} \quad (5.3.46)$$

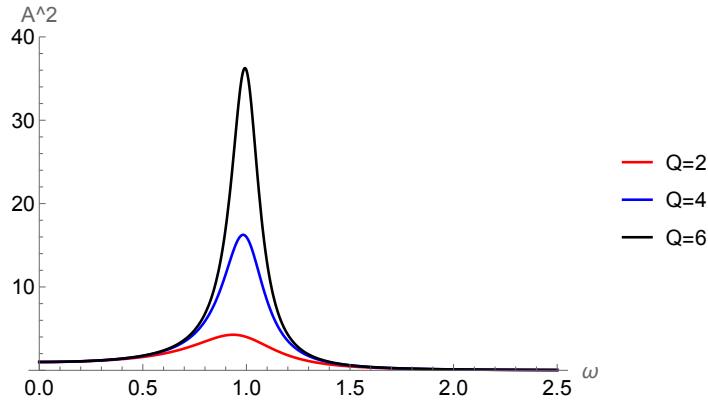
waarbij we $\rho = \frac{\tilde{D}}{2m}$ hebben gesteld. De aard van de oplossingen hangt af van de discriminant van de karakteristieke vergelijking (zie (5.1.14)): $z^2 + 2\rho z + \omega_0^2 = 0$. Deze discriminant is gelijk aan $4(\rho^2 - \omega_0^2)$.

Indien $\rho > \omega_0$ is de beweging exponentieel gedempt (=overdemping). Dit is ook het geval indien $\rho = \omega_0$ (=kritische damping). Indien $\rho < \omega_0$ dan is de beweging oscillend gedempt (=onderdemping). (Ga dit expliciet na!)

Dit verschillende gedrag wordt ook nog gekarakteriseerd door de dimensieloze *Q-factor* ('Q' for Quality):

$$Q = \frac{\omega_0}{2\rho} = \frac{\sqrt{km}}{\tilde{D}}. \quad (5.3.47)$$

Indien $Q > 1/2$ hebben we dus oscillend gedempt gedrag (onderdemping), waarbij het aantal oscillaties vooraleer er damping optreedt groter is voor grotere Q .



Figuur 5.1: De respons A^2 (5.3.52) als functie van ω , voor $\omega_0 = 1$ en $Q = \omega_0/(2\rho) = 2, 4, 6$.

- **4de geval: wel демping, oscillerende uitwendige kracht**

Dit is het interessantste geval, als uiteindelijk fysisch model voor een resonator met een bepaalde демping. Het model luidt:

$$\begin{cases} u'' + 2\rho u' + \omega_0^2 u = a \cos \omega t \\ u(0) = u_0 \\ u'(0) = u_1 \end{cases} \quad (5.3.48)$$

Uit het voorgaande weten we dat de algemene oplossing van de gereduceerde DV gedempt is; dit gedeelte van de oplossing zal dus na verloop van voldoende tijd uitgestorven zijn, m.a.w. de beweging zal dan bepaald worden door de particuliere oplossing van de complete DV en onafhankelijk zijn van de beginvoorwaarden. De niet-gedempte particuliere oplossing wordt gegeven door:

$$\tilde{u}(t) = \frac{a}{m} \frac{1}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\rho^2\omega^2}} \cos(\omega t - \delta) \quad (5.3.49)$$

waarbij de fasinhoek δ is ingevoerd via:

$$\cos \delta = \frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\rho^2\omega^2}}, \quad \sin \delta = \frac{2\rho\omega}{\sqrt{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\rho^2\omega^2}}. \quad (5.3.50)$$

De uiteindelijke beweging - na voldoende grote tijd - loopt dus een fase δ achter op de pulserende uitwendige kracht. Voor zeer kleine frequentie ω van de uitwendige kracht is δ zeer klein, m.a.w. de respons van de oscillator is bijna in fase met de excitatie. Voor $\omega = \omega_0$ de eigenfrequentie, loopt de respons een fase $\frac{\pi}{2}$ achter op de excitatie. Voor een grote frequentie ω van de excitatie wordt de fase π en is de respons tegengesteld gericht t.o.v. de excitatie.

Nog belangrijker is de amplitude A van de respons die ons vertelt welke frequenties resoneren in de oscillator. Voor $\rho^2 < \omega_0^2/2$ ($Q > 1/\sqrt{2}$) vertoont de amplitude

een maximum voor (zie ook figuur 5.1):

$$\omega_R^2 = \omega_0^2 - 2\rho^2. \quad (5.3.51)$$

Dit is de frequentie waarmee de resonator maximaal zal resoneren (grootste respons). Voor grote Q -factor hebben we $\omega_R \approx \omega_0$ en kunnen we de ω -afhankelijkheid van de amplitude benaderen als (we kijken hier naar A^2 , wat proportioneel is met de energierespons):

$$\begin{aligned} A^2 &\propto \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + 4\rho^2\omega^2}, \\ &\approx \frac{Q^2}{\omega_0^4} \frac{1}{1 + 4Q^2(\frac{\Delta\omega}{\omega_0})^2} \end{aligned} \quad (5.3.52)$$

waarbij $\Delta\omega = \omega - \omega_0$. We zien dus dat voor grotere Q -factor de respons groter zal zijn, tegelijk zal deze als functie van ω scherper gepiekt zijn rond $\omega = \omega_0$. Inderdaad uit (5.3.52) zien we voor de piekbreedte $\Delta\omega \sim \omega_0/Q$ (zie figuur 5.1).

Een belangrijke toepassing is het gebruik van een resonator als een klok. Hierbij wordt de tijd bepaald in termen van de referentiefrequentie ω_0 . Deze dient zo precies mogelijk uit het resonantiegedrag te worden gemeten, en hiervoor wil je dan een systeem met een zo groot mogelijke Q -factor. Zo hebben de beste atoomklokken een Q -factor van orde 10^{15} .

Een andere toepassing is het gebruik als een zogenaamde *band-pass filter*. Hierbij wil je uit een extern signaal $F(t)$ de frequenties filteren in een interval $[\omega_0 - \Delta\omega, \omega_0 + \Delta\omega]$. Je wil met andere woorden dat enkel deze frequenties resoneren. Denk aan een radio-ontvanger, waarbij het signaal van een bepaald radiostation zich bevindt in een klein frequentie-interval rond een bepaalde ω_0 . Hiervoor hebben we dan een Q -waarde $Q \leq \frac{\omega_0}{\Delta\omega}$ nodig. In het bijzonder, voor het seriegeschakelde RLC circuit hebben we:

$$\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}} \quad \rho = \frac{R}{2L} \quad Q = \frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C}}. \quad (5.3.53)$$

Om met dergelijke seriële RLC ontvanger een bepaald radiostation (ω_0) te kiezen, moet dan L of C worden aangepast.

Hoofdstuk 6

Fourier expansies

6.1 Fourier reeks

De Fourier reeks voor een periodieke functie $f(t)$ met periode 2π , $f(t) = f(t + 2\pi)$, wordt gedefinieerd als:

$$f(t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nt) + b_n \sin(nt), \quad (6.1.1)$$

waarbij¹:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t) \cos(nt) \\ b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t) \sin(nt). \end{aligned} \quad (6.1.2)$$

Bemerk dat we wegens de veronderstelde periodiciteit van $f(t)$ en de circulaire functies $\cos(nt), \sin(nt)$, een willekeurig integratieinterval $[t_0, t_0 + 2\pi]$ kunnen gebruiken. We kiezen hier $t_0 = -\pi$ zodat de integratiegrenzen symmetrisch zijn. Bemerk ook dat we voor even functies, $f(t) = f(-t)$, hebben dat $b_n = 0$. Voor oneven functies, $f(t) = -f(-t)$ hebben we dat $a_n = 0$.

Verder worden in plaats van de $\cos(\omega t)$ en $\sin(\omega t)$ basisfuncties, ook dikwijls de exponentiëlen $e^{\pm i\omega t} = \cos \omega t \pm i \sin \omega t$ gebruikt. We kunnen (6.1.1) dan ook makkelijk herschrijven als:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{int}, \quad (6.1.3)$$

met

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{a_0}{2} \\ c_n &= \frac{a_n - ib_n}{2} \quad c_{-n} = \frac{a_n + ib_n}{2} \quad (n > 0) \end{aligned} \quad (6.1.4)$$

¹Bemerkt dat $a_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t)$.

met voor alle c_n dezelfde uitdrukking:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt f(t) e^{-int}. \quad (6.1.5)$$

Voor reële functies $f(t)$ hebben we $c_{-n} = \overline{c_n}$.

De coëfficiënten $\{a_n, b_n\}$ (of equivalent $\{c_n\}$) noemen we het *Fourierspectrum*. Dit spectrum geeft ons informatie over de verschillende frequenties $f_n = \frac{|n|}{2\pi}$ in een signaal. Als dusdanig kunnen we de Fourierexpansie (6.1.1) zien als een transformatie van het *tijdsdomein*² naar het *frequentiedomein*:

$$f(t) \quad \text{met} \quad t \in [-\pi, \pi] \quad \rightarrow \quad \{a_n, b_n\} \quad (\text{of } \{c_n\}). \quad (6.1.6)$$

Orthogonale basisfuncties

We kunnen de Fourierreeks opvatten als een expansie van een algemene periodieke functie in de basis van *Fouriermodes* (zie ook een eerder bordcollege):

$$\{1/2, \cos(t), \sin(t), \cos(2t), \sin(2t), \dots, \cos(nt), \sin(nt), \dots\}. \quad (6.1.7)$$

T.o.v. het L^2 inproduct voor kwadratische integreerbare functies in $]-\pi, \pi[$ (2.1.20), zoals gedefinieerd in hoofdstuk 2, zijn deze basisfuncties orthogonaal:

$$\begin{aligned} < \sin(mt), \sin(nt) > &= \int_{-\pi}^{\pi} dt \sin(mt) \sin(nt) = \pi \delta_{m,n}, \quad m \neq 0 \\ < \cos(mt), \cos(nt) > &= \int_{-\pi}^{\pi} dt \cos(mt) \cos(nt) = \begin{cases} \pi \delta_{m,n}, & m \neq 0 \\ 2\pi, & m = n = 0 \end{cases} \\ < \cos(mt), \sin(nt) > &= \int_{-\pi}^{\pi} dt \cos(mt) \sin(nt) = 0 \quad (\text{voor alle } n, m \in \mathbb{Z}). \end{aligned} \quad (6.1.8)$$

We zien dan inderdaad dat de Fouriercoëfficiënten in de Fourierexpansie (6.1.1) consistent zijn met deze orthogonaliteitstrelaties, bvb.:

$$\begin{aligned} < f(t), \sin(mt) > &= < \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(nt) + b_n \sin(nt), \sin(nt) > \\ &= b_m < \sin(mt), \sin(mt) > \\ &= \pi b_m, \end{aligned} \quad (6.1.9)$$

wat precies overeenkomt met (6.1.2). We geven hier tot slot ook de corresponderende orthogonaliteitstrelaties voor de exponentiële functies³:

$$< e^{imt}, e^{int} > = \int_{-\pi}^{\pi} dt e^{i(n-m)t} = 2\pi \delta_{n,m}. \quad (6.1.11)$$

²Wanneer we t als een tijdsvariabele opvatten.

³Voor algemene complexe functies $f(t)$ en $g(t)$ wordt het L^2 inproduct gedefinieerd als:

$$< f, g > = \int_{-\pi}^{\pi} dt \bar{f}(t)g(t) \quad (6.1.10)$$

Algemene periodes

De Fourierreeks (6.1.1) kan makkelijk worden uitgebreid naar functies met algemene periode T , $f(t) = f(t + T)$, door over te gaan op de variabele $u = \frac{2\pi}{T}t$ en het beschouwen van $g(u) = f(t(u)) = f(\frac{T}{2\pi}u)$. Toepassing van de bovenstaande formules op de periodieke functie $g(u) = g(u + 2\pi)$ geeft dan na het herschrijven in functie van t :

$$f(t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) + b_n \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right), \quad (6.1.12)$$

waarbij:

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{2}{T} \int_0^T dt f(t) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \\ b_n &= \frac{2}{T} \int_0^T dt f(t) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right), \end{aligned} \quad (6.1.13)$$

met corresponderende orthogonaliteitsrelaties:

$$\begin{aligned} \left\langle \sin\left(\frac{2\pi m}{T}t\right), \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \right\rangle &= \int_0^T dt \sin\left(\frac{2\pi m}{T}t\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) = \frac{T}{2} \delta_{m,n}, \quad m \neq 0 \\ \left\langle \cos\left(\frac{2\pi m}{T}t\right), \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \right\rangle &= \int_0^T dt \cos\left(\frac{2\pi m}{T}t\right) \cos\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) = \begin{cases} \frac{T}{2} \delta_{m,n}, & m \neq 0 \\ T, & m = n = 0 \end{cases} \\ \left\langle \cos\left(\frac{2\pi m}{T}t\right), \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) \right\rangle &= \int_0^T dt \cos\left(\frac{2\pi m}{T}t\right) \sin\left(\frac{2\pi n}{T}t\right) = 0 \quad (\text{voor alle } n, m \in \mathbb{Z}). \end{aligned} \quad (6.1.14)$$

In termen van de exponentiëlen wordt dit:

$$f(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi n}{T} t}, \quad (6.1.15)$$

waarbij:

$$c_n = \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) e^{-i \frac{2\pi n}{T} t}, \quad (6.1.16)$$

met de corresponderende orthogonaliteitsrelatie:

$$\left\langle e^{i \frac{2\pi m}{T} t}, e^{i \frac{2\pi n}{T} t} \right\rangle = \int_0^T dt e^{i \frac{2\pi(n-m)}{T} t} = T \delta_{n,m}. \quad (6.1.17)$$

6.1.1 Convergentie-eigenschappen

Een belangrijke vraag is dan uiteraard in welke mate de Fourierreeks (6.1.1) effectief convergeert naar de functie $f(t)$. We geven hier de belangrijkste convergentiestellingen

(met telkens verschillende voorwaarden op de functie f !). Schrijven we de partieel som (de getruncerde expansie) als:

$$f_N(t) = \frac{1}{2}a_0 + \sum_{n=1}^N a_n \cos(nt) + b_n \sin(nt) = \sum_{n=-N}^N c_n e^{int}, \quad (6.1.18)$$

dan hebben we:

A Convergentie in het gemiddelde voor L^2 -functies

Voor elke kwadratisch integreerbare functie met periode 2π hebben we dat:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \|f - f_N\| = 0, \quad (6.1.19)$$

met $\|f - f_N\|$ de L^2 -norm van de fout, i.e. de wortel van de geïntegreerde kwadratische fout:

$$\|f - f_N\|^2 = \langle (f - f_N), (f - f_N) \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} dt |f(t) - f_N(t)|^2. \quad (6.1.20)$$

B Uniforme, absolute convergentie voor continue functies met stuksgewijs continue afgeleide

Als de periodieke functie f met periode 2π continu is in \mathbb{R} met afgeleide f' die stuksgewijs continu is, dan convergeert haar Fourierreeks absoluut en uniform in \mathbb{R} naar f . In het bijzonder kan men aantonen dat:

$$|f(t) - f_N(t)| \leq \frac{C}{\sqrt{N}}, \quad (6.1.21)$$

waarbij:

$$C^2 = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt |f'(t)|^2. \quad (6.1.22)$$

Deze stelling veralgemeent naar:

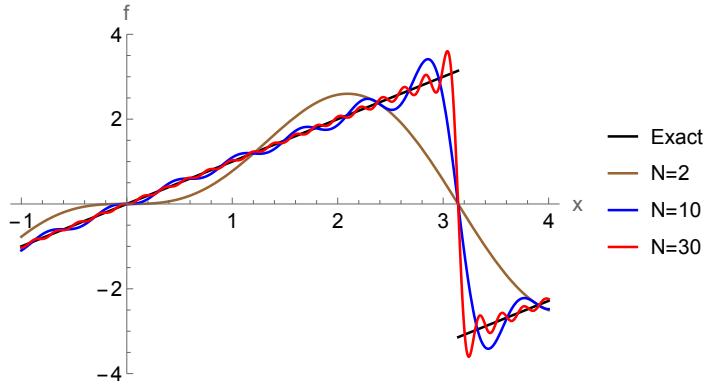
Als de periodieke functie f met periode 2π continu is in \mathbb{R} en de afgeleiden $f', f'', \dots, f^{(m-1)}$ zijn continu in \mathbb{R} terwijl $f^{(m)}$ stuksgewijs continu is, dan geldt voor elke partieelsom $f_N(t)$:

$$|f(t) - f_N(t)| \leq \frac{C}{N^{m-\frac{1}{2}}}, \quad (6.1.23)$$

waarbij:

$$C^2 = \frac{1}{(2m-1)\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt |f^{(m)}(t)|^2. \quad (6.1.24)$$

Hoe beter de continuïteitseigenschappen van de functie, hoe beter dus ook het convergentiedrag van haar Fourierreeks.



Figuur 6.1: Verschillende Fourierbenaderingen van de zaagtandfunctie (6.1.27). Bemerk het Gibbs-fenomeen rond het discontinue punt $t_0 = \pi$.

C Puntsgewijze convergentie voor stuksgewijs gladde functies

Ook wanneer de functie $f(t)$ discontinue punten heeft, zal de Fourierreeks convergeren, weliswaar niet langer uniform, dat zegt de volgende stelling:

Als de functie $f(t)$, periodiek met periode 2π , stuksgewijs glad is, dan hebben we:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} f_N(t) = f(t_+) + f(t_-), \quad (6.1.25)$$

met puntsgewijze convergentie in \mathbb{R} .

Voor stuksgewijs gladde functies convergeert de Fourierreeks in de discontinue punten dus naar het gemiddelde van de linker- en rechterlimiet. Bemerkt ook dat voor dergelijke functies de convergentie slechts puntsgewijs is. Dit betekent dat de vereiste waarde van $N = N_\epsilon$ om de fout kleiner te krijgen dan een bepaalde ϵ , afhangt van t :

$$|f(t) - f_N(t)| < \epsilon \quad \text{voor } N > N_\epsilon(t). \quad (6.1.26)$$

In het bijzonder wordt de convergentie steeds slechter naarmate men dichter bij een discontinue punt t_0 komt, $\lim_{t \rightarrow t_0} N_\epsilon(t) = \infty$, dit is het zogenaamde **Gibbs fenomeen**. We illustreren dit hieronder voor de Fourierexpansie van de zaagtandfunctie.

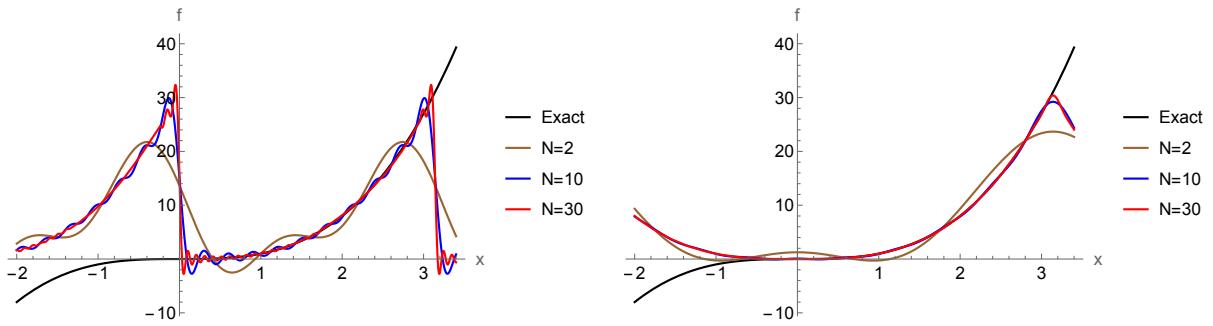
Voorbeeld: de zaagtandfunctie.

Beschouw de periodieke zaagtandfunctie f met periode 2π die in $]-\pi, \pi[$ gegeven wordt door:

$$f(t) := t, \quad -\pi < t < \pi. \quad (6.1.27)$$

Deze functie f is oneven; we hebben dus dat in het reële fourierspectrum alle Fouriercoëfficiënten a_k , $k = 0, 1, 2, \dots$ nul zijn. Meerbepaald vinden we voor het reële fourierspectrum (6.1.2):

$$\begin{cases} a_k = 0, & k = 0, 1, 2, \dots \\ b_k = (-1)^{k-1} \frac{2}{k}, & k \in \mathbb{N} \end{cases} \quad (6.1.28)$$



Figuur 6.2: (a) Fourierreeksbenaderingen met de periodieke basis over $[0, \pi]$ ((6.1.32)) voor de functie $f(t) = t^3$. Bemerkt het Gibbsfenomeen bij de randen van het interval. Bemerkt ook de convergentie naar de periodieke extensie met periode π voor $t \notin]0, \pi[$. (b): Fouriercosinusreeksbenaderingen ((6.1.37)) voor dezelfde functie. Bemerkt de verbeterde convergentie bij de randen. Bemerkt ook voor $t \notin [0, \pi]$ de convergentie naar de periodieke extensie van de even functie $\tilde{f}(t) = |t|^3$, nu met periode 2π .

Of dus:

$$\frac{1}{2} (f(t_+) + f(t_-)) = \sum_{k=1}^{+\infty} 2 \frac{(-1)^{k-1}}{k} \sin kt, \quad t \in \mathbb{R} \quad (6.1.29)$$

In figuur (6.1) plotten we enkele getrunceerde Fourierbenaderingen die, zoals hierboven reeds vermeld, slechter convergeren rond de discontinue punten (Gibbs fenomeen).

Het is verder interessant van eens te focussen op het interval $-\pi < t < \pi$. Daar hebben we dan:

$$t = \sum_{k=1}^{+\infty} 2 \frac{(-1)^{k-1}}{k} \sin kt \quad (6.1.30)$$

Leiden we deze fourierreeks termsgewijs af, dan ontstaat de reeks

$$2 \sum_{k=1}^{+\infty} (-1)^{k-1} \cos kt, \quad (6.1.31)$$

die helemaal niet naar 1 convergeert, integendeel ze divergeert voor alle t ! Dit begrijpen we uit het feit dat de afgeleide functie $f'(t)$ geen stuksgewijs continue functie op \mathbb{R} meer is.

6.1.2 Periodieke extensies en de Fouriercosinusreeks

Stel we hebben een gladde niet-periodieke functie, met $f(0) \neq f(\pi)$, die we in het interval $[0, \pi]$ willen benaderen met een Fourierreeks. Over dit interval leest de Fourierexpansie in de periodieke Fourierbasis over $[0, \pi]$ (zie (6.1.12) met $T = \pi$):

$$f(t) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos(2nt) + b_n \sin(2nt), \quad (6.1.32)$$

met

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dt f(t) \cos(2nt) \\ b_n &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dt f(t) \sin(2nt). \end{aligned} \quad (6.1.33)$$

Per constructie zal deze reeks over de gehele reële as convergeren naar haar zogenaamde **periodieke extensie** $f_F(t)$:

$$f_F(t + n\pi) = f(t) \quad \text{voor } t \in]0, \pi[\quad \text{en} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (6.1.34)$$

Wanneer $f(0) \neq f(\pi)$, vertoont de periodieke extensie $f_F(t)$ discontinuïteiten in de punten $t = n\pi$, en is bijgevolg de convergentie naar $f(t)$ slecht op de randpunten $t = 0, \pi$ ($f_F(t)$ valt dan onder de voorwaarden van stelling C in § 6.1.1). Zie ter illustratie fig 6.2 (a).

Een andere, beter convergerende Fourierexpansie krijgen we door de Fourierbasis over het grotere interval $[-\pi, \pi]$ te beschouwen. Breiden we hiervoor de functie $f(t)$ uit naar een even functie over het interval $[-\pi, +\pi]$:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(t) &= f(t) \quad \text{voor } t \geq 0 \\ \tilde{f}(t) &= f(-t) \quad \text{voor } t \leq 0, \end{aligned} \quad (6.1.35)$$

dan vertoont de periodieke extensie (ditmaal met periode 2π) van deze functie geen discontinue punten. Hierdoor zal deze Fourierexpansie beter convergeren en in het bijzonder zal deze ook beter convergeren naar de originele functie in het interval $[0, \pi]$ (valt nu onder de voorwaarden van stelling B in § 6.1.1). De aldus geconstrueerde **Fouriercosinusreeks** leest dan:

$$\tilde{f}(t) = \frac{\tilde{a}_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{a}_n \cos(nt), \quad (6.1.36)$$

met

$$\begin{aligned} \tilde{a}_0 &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt \tilde{f}(t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dt f(t) \\ \tilde{a}_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dt \tilde{f}(t) \cos(nt) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi dt f(t) \cos\left(\frac{\pi n}{L} t\right). \end{aligned} \quad (6.1.37)$$

Bemerkt dat de sinustermen verdwijnen ($\tilde{b}_n = 0$) aangezien \tilde{f} even is. In figuur 6.2 (b) kan je expliciet de verbeterde convergentie zien voor het geval $f(t) = t^3$.

Je kan tot slot zelf de **Fouriersinusreeks** construeren, door $f(t)$ analoog uit te breiden naar een oneven functie $\tilde{f}(t) = -\tilde{f}(-t)$ op het interval $[-\pi, \pi]$.

6.2 De discrete Fouriertransformatie

Praktisch gebeurt alles van signaalverwerking en analyse vandaag de dag digitaal, waarbij men vertrekt van discrete signalen en dan gebruik maakt van de discrete Fouriertransformatie (DFT). Deze kan gezien worden als de digitale versie van de net besproken Fourierexpansie voor continue functies. We bouwen deze DFT hier op vanuit het oogpunt van Lineaire Algebra.

We beschouwen een discreet signaal $x(n\Delta t) = x_n$ verkregen op N discrete tijdstippen $t_n = n\Delta t$, met $n = 0, \dots, N - 1$. De DFT zal zo'n signaal $\mathbf{x} = (x_0, x_1, \dots, x_{N-1})$ ontbinden in zijn verschillende frequentie componenten (of nog: Fouriercomponenten): $\sum_n x_n \mathbf{e}_n = \sum_k \tilde{x}_k \mathbf{v}_k$. Hierbij worden de vectoren \mathbf{v}_k gedefinieerd als de eigenvectoren van de translatie-matrix \mathbf{T} bepaald door $\mathbf{T}(x_0, x_1, \dots, x_{N-2}, x_{N-1}) = (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_0)$,⁴ of in matrixvorm:

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.2.38)$$

Deze reële translatiematrix is orthogonaal (en dus ook unitair): $\mathbf{T}^{-1} = \mathbf{T}^T = \mathbf{T}^\dagger$. Inderdaad, je kan expliciet nagaan dat $\mathbf{T}^T(x_0, x_1, \dots, x_{N-2}, x_{N-1}) = (x_{N-1}, x_0, \dots, x_{N-3}, x_{N-2})$, wat overeenkomt met een translatie in de andere richting, zodat $\mathbf{T}\mathbf{T}^T = \mathbf{I}$ (een translatie in één richting na een translatie in de tegengestelde richting geeft de identiteit).

Voor de eigenwaarden λ_k en eigenvectoren \mathbf{v}_k van **algemene unitaire matrices** \mathbf{U} hebben we volgende twee eigenschappen:

- Eigenwaarden hebben modulus 1, $|\lambda_k| = 1$.

Dit volgt uit:

$$\mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_k = \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \mathbf{v}_k = \overline{\lambda_k} \lambda_k \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_k \rightarrow |\lambda_k|^2 = 1 \rightarrow |\lambda_k| = 1 \quad (6.2.39)$$

We hebben dus dat elke eigenwaarde in het complexe vlak op de eenheidscirkel ligt, $\lambda_k = e^{i\theta_k}$.

- Eigenvectoren \mathbf{v}_k zijn orthogonaal. Dit volgt uit:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{U} \mathbf{v}_p &= \lambda_p \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_p \\ \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{U} \mathbf{v}_p &= \overline{(\mathbf{v}_p^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{v}_k)} = \overline{\lambda_k^{-1}} \overline{(\mathbf{v}_p^\dagger \mathbf{v}_k)} = \lambda_k \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_p \\ \rightarrow \mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_p &= 0 \quad \text{als } \lambda_k \neq \lambda_p \end{aligned} \quad (6.2.40)$$

Op de tweede lijn gebruikten we hier voor de tweede gelijkheid dat de complex toegevoegde van een getal gelijk is aan het hermitisch toegevoegde. Voor de derde gelijkheid gebruiken we dat $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$, voor de vierde gelijkheid gebruiken we tenslotte dat $\lambda_k = e^{i\theta_k}$. Verder merken we nog op dat in het geval van gelijke eigenwaarden, de eigenvectoren via een Gramm-Schmidt procedure nog steeds orthogonaal kunnen gekozen worden.

⁴DFT veronderstelt een periodieke uitbreiding van het signaal voor verdere tijdstippen $N\Delta t, (N+1)\Delta t, \dots$, met $x_N = x_0, x_{N+1} = x_1, \dots$, zodat dit inderdaad overeenkomt met een translatie.

Keren we terug naar de specifieke translatiematrix \mathbf{T} , dan zien we meteen uit $\mathbf{T}^N = \mathbf{I}$ dat de karakteristieke vergelijking luidt: $\lambda^N = 1$. Zo vinden we de eigenwaarden als de N wortels:

$$\lambda_k = e^{i\frac{2\pi k}{N}}, \quad (6.2.41)$$

met $k = 0, \dots, N-1$. Bemerk dat k slechts bepaald is mod N : onder $k \rightarrow k+sN$ voor $s \in \mathbb{Z}$ blijft de eigenwaarde gelijk. Je kan nu expliciet nagaan dat de corresponderende eigenvectoren volgende uitdrukking hebben:

$$\mathbf{v}_k = \frac{1}{\sqrt{N}}(1, e^{i\frac{2\pi k}{N}}, e^{i\frac{2\pi 2k}{N}}, \dots, e^{i\frac{2\pi nk}{N}}, \dots) \quad (6.2.42)$$

waarbij de voorfactor ervoor zorgt dat de eigenvectoren zijn genormeerd op één: $\mathbf{v}_k^\dagger \mathbf{v}_k = 1$. We combineren dan al de orthonormale kolom-eigenvectoren in de unitaire matrix $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_0 \ \mathbf{v}_1 \ \dots \ \mathbf{v}_{N-1}]$, met componenten $V_{nk} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2\pi nk}{N}}$ ⁵. Zo vinden we de componenten \tilde{x}_k in de nieuwe Fourierbasis als (zie §2.3.2):

$$\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{x} = \mathbf{V}^\dagger \mathbf{x}. \quad (6.2.43)$$

Expliciet uitgeschreven wordt dit:

$$\boxed{\tilde{x}_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} x_n e^{-i\frac{2\pi nk}{N}}} \quad (6.2.44)$$

Voor de inverse transformatie hebben we dan:

$$\mathbf{x} = \mathbf{V} \tilde{\mathbf{x}}, \quad (6.2.45)$$

wat nu expliciet leest:

$$\boxed{x_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{x}_k e^{+i\frac{2\pi nk}{N}}}. \quad (6.2.46)$$

Relatie met de Fourierreeks

Het is niet verwonderlijk dat we de Fourierreeks voor functies $f(t)$ van een continue variabele kunnen terugvinden als de limiet van de DFT, waarbij we het aantal gesamplede punten N voor een vaste periode T naar oneindig laten gaan, zodat de tijd $\Delta t = T/N$ tussen twee gesamplede punten naar nul gaat. Om deze limiet formeel aan te tonen, beschouwen we $N = 2M + 1$ oneven, schrijven we $t_n = n\Delta t = nT/N$ en

⁵We nemen hier voor de matrix indices: $n, k = 0, 1, \dots, N - 1$, wat de standaardconventie is bij DFT.

identificeren $x_n = f(t_n)$. Dit laat ons toe de transformatie (6.2.46) te herschrijven:

$$\begin{aligned}
 x_n = f(t_n) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{2M} \tilde{x}_k e^{+i \frac{2\pi n k}{N}} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^M \tilde{x}_k e^{+i \frac{2\pi n k}{N}} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=M+1}^{2M} \tilde{x}_k e^{+i \frac{2\pi n(k-N)}{N}} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^M \tilde{x}_k e^{+i \frac{2\pi k}{T} t_n} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'=-M}^{-1} \tilde{x}_{k'+N} e^{+i \frac{2\pi k'}{T} t_n} \\
 &= \sum_{k=-M}^M c_k e^{+i \frac{2\pi k}{T} t_n}.
 \end{aligned} \tag{6.2.47}$$

Op de tweede lijn splitsen we de sommatie op en maken voor de tweede sommatie gebruik van de shift-invariantie $k \rightarrow k - N$ voor de exponentiële factor. Op de derde lijn identificeren we $n/N = t_n/T$ en voeren we voor de tweede sommatie een nieuwe sommatie-variabele $k' = k - N$ in. Op de laatste lijn nemen we de twee sommaties terug samen en identificeren we $c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \tilde{x}_k$ voor $0 \leq k \leq M$ en $c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \tilde{x}_{k+N}$ voor $-M \leq k < 0$. Met deze identificaties vinden we dan inderdaad in de limiet $N \rightarrow \infty$ (en dus ook $M \rightarrow \infty$) de uitdrukking voor de Fourierreeks (6.1.15) terug.

Verder, kunnen we met bovenstaande identificaties de inverse transformatie (6.2.44) schrijven als:

$$\begin{aligned}
 c_k &= \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} f(t_n) e^{-i \frac{2\pi k}{T} t_n} \\
 &= \frac{1}{T} \sum_{n=0}^{N-1} \Delta t f(t_n) e^{-i \frac{2\pi k}{T} t_n} \\
 &\approx \frac{1}{T} \int_0^T dt f(t) e^{-i \frac{2\pi k}{T} t},
 \end{aligned} \tag{6.2.48}$$

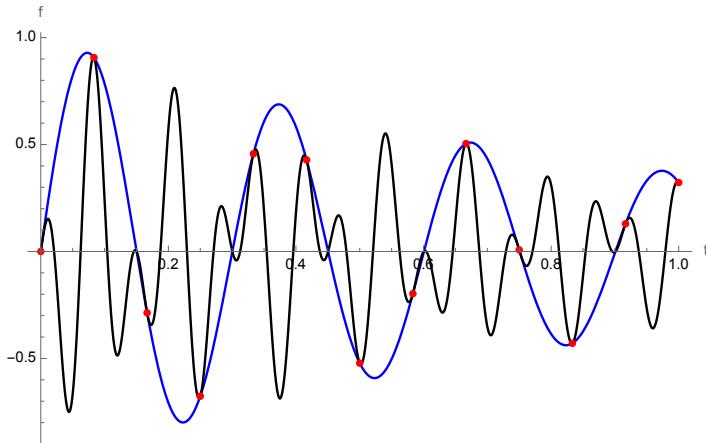
waarbij we in de laatste gelijkheid de integraaluitdrukking voor de Fourierreekscoëfficiënten (6.1.16) terugvinden, in de limiet $N \rightarrow \infty$ ($\Delta t = T/N \rightarrow 0$).

Aliasing

Om een idee te krijgen van het effect van een DFT kijken we naar de componenten \tilde{x}_k voor het eenvoudig analoge signaal $x(t) = \cos(2\pi f t)$, met frequentie f , dat we samplen met frequentie $f_S = 1/\Delta t$. Vergelijken we $x_n = \cos(2\pi f n \Delta t) = (e^{i 2\pi f n \Delta t} + e^{-i 2\pi f n \Delta t})/2$ met (6.2.46) dan verwachten we dat de componenten \tilde{x}_k gepiekt zullen zijn rond:

$$k_1 = Nf/f_S \mod N \quad \text{en} \quad k_2 = -Nf/f_S \mod N. \tag{6.2.49}$$

Door met het DFT commando van $\textcircled{C}\text{Maple}$ te experimenteren kan je bevestigen dat dit inderdaad zo is. In het bijzonder voor $f < f_S/2$ vinden we maxima rond $k_1 = Nf/f_S$



Figuur 6.3: Aliasing: twee continue functies (blauw en zwart) die worden gesampled met frequentie $f_s = 12$ hebben een identiek gesampled signaal (rode punten). De zwarte functie heeft frequentiecomponenten f groter dan de Nyquist frequentie, $f > f_s/2 = 6$.

en $k_2 = N - Nf/f_s$. Voor grotere frequenties $f > f_s/2$ is er echter een probleem, in die zin dat het gesamplede signaal, en de hieruit verkregen DFT gelijk zijn aan dat voor een ander signaal met kleinere frequentie $f < f_s/2$. Men spreekt over *aliasing* (zie ook figuur 6.3 ter illustratie) en bij digitalisering van een analoog audio-signaal met sample frequentie f_s zal men eerst de frequenties $f > f_s/2$ uitfilteren om dit probleem te vermijden. CD opnames hebben bijvoorbeeld typisch een sample rate van 44.1 kHz, en men filtert dus eerst de frequenties $f > 22$ kHz uit vooraleer men overgaat tot de opname. Deze frequentie $f_N = f_s/2$ wordt de **Nyquist frequentie** genoemd

6.2.1 Fast Fourier Transform (FFT)

De DFT, $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{V}^\dagger \mathbf{x}$, en even goed de inverse DFT, $\mathbf{x} = \mathbf{V} \tilde{\mathbf{x}}$, komt dus neer op een $(N \times N)$ complexe matrixtransformatie van een N -components vector. Voor een generieke matrix vergt dit N^2 complexe vermenigvuldigingen (ga zelf na). Het FFT algoritme van Cooley en Tukey buit de specifieke structuur van \mathbf{V} uit, om dit terug te brengen tot $\sim N \log N$ vermenigvuldigingen. Het belang van dit algoritme, met zijn exponentiële reductie in het aantal vermenigvuldigingen, kunnen we niet overschatten: de DFT is het werkpaard in onze digitale wereld met toepassingen op gigantische aantallen datapunten N , zonder het FFT algoritme zou dit gewoon niet mogelijk zijn.

Om het FFT algoritme te schetsen, schrijven we de $(N \times N)$ DFT-matrix als $\mathbf{V}_N =$

$\frac{1}{\sqrt{N}}\mathbf{F}_N$ met:

$$\mathbf{F}_N = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & w & w^2 & \dots & w^{N-1} \\ 1 & w^2 & w^4 & \dots & w^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & w^{N-1} & w^{2(N-1)} & \dots & w^{(N-1)^2} \end{bmatrix}, \quad (6.2.50)$$

waarbij $w = e^{i\frac{2\pi}{N}}$. De crux van het algoritme berust dan op een matrixfactorisatie die de DFT op een N -componentsvector essentieel herleidt tot 2 DFTs op $N/2$ -components vectoren (we beperken hier ons al meteen tot waarden van N die een macht van twee vormen, $N = 2^l$ voor $l \in \mathbb{N}$). Deze beroemde Cooley-Tukey factorisatie leest:

$$\mathbf{F}_N = \begin{bmatrix} \mathbf{I}_{N/2} & \mathbf{D}_{N/2} \\ \mathbf{I}_{N/2} & -\mathbf{D}_{N/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{N/2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{F}_{N/2} \end{bmatrix} \mathbf{P}_{even/oneven}, \quad (6.2.51)$$

hier is $\mathbf{P}_{even/oneven}$ de permutatiematrix die de even en oneven vectorcomponenten apart sorteert: $\mathbf{P}(x_0, x_1, x_2, \dots, x_{N-1}) = (x_0, x_2, \dots, x_{N-2}, x_1, x_3, \dots, x_{N-1})$. De middelste matrix voert dan apart een DFT uit op de eerste $N/2$ en laatste $N/2$ componenten (de even en oneven componenten van de originele vector). De linkse matrix bestaat uit vier blokken, met in elke blok een $(N/2 \times N/2)$ diagonaalmatrix, met enerzijds de eenheidsmatrix $\mathbf{I}_{N/2} = diag(1, 1, \dots)$ en anderzijds de matrix $\mathbf{D} = diag(1, w, w^2, \dots, w^{(N/2-1)})$. Als concreet voorbeeld, voor $N = 4$ leest deze factorisatie (ga zelf na):

$$\mathbf{F}_4 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & i & -1 & -i \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -i & -1 & i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & i \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (6.2.52)$$

Laat ons dan al eens het aantal benodigde complexe vermenigvuldigingen tellen voor een DFT transformatie werkende op een bepaalde vector, waarbij we gebruik maken van de factorisatie (6.2.51). Eerst hebben we de even/oneven permutatie van de componenten, deze vergt geen vermenigvuldigingen. De middelste matrixtransformatie, met zijn twee DFT transformaties, telkens op de helft van de componenten, vergt $2 \times (N/2)^2 = N^2/2$ vermenigvuldigingen. De laatste (meest linkse) transformatie vergt tot slot $N/2$ matrixvermenigvuldigingen (vermenigvuldiging van de $N/2$ diagonaalcomponenten van $\mathbf{D}_{N/2}$ met de corresponderende onderste componenten van de vector). Zo krijgen we dus in totaal $N^2/2 + N/2 = N/2(N+1)$ vermenigvuldigingen, wat al een reductie betekent t.o.v. de N^2 vermenigvuldigingen van de oorspronkelijke matrixtransformatie.

Dit is echter nog niet de exponentiële reductie van het FFT algoritme. Het FFT algoritme past de factorisatie (6.2.51) recursief toe, waarbij we als volgende stap de $\mathbf{F}_{N/2}$ transformaties reduceren tot vier $\mathbf{F}_{N/4}$ transformaties gevuld door opnieuw $2 \times N/4 = N/2$ vermenigvuldigingen van bepaalde vectorcomponenten door diagonaalcomponenten van $\mathbf{D}_{N/4}$. Doen we dit in totaal l keer dan eindigen we bij $\mathbf{F}_1 = 1$ en komen we uiteindelijk tot een factorisatie, met eerst een permutatie die geen vermenigvuldigingen kost, gevuld door l matrixoperaties die telkens $N/2$ vermenigvuldigingen kosten. Dit geeft in totaal dan $l \times N/2 = \frac{N}{2} \log_2 N$ vermenigvuldigingen.

Hoofdstuk 7

Partiële differentiaalvergelijkingen

7.1 De warmte- en golfvergelijking

In dit hoofdstuk beschouwen we **partiële differentiaalvergelijkingen** (PDVs) voor functies $u(\vec{x}, t)$ van meerdere variabelen (in contrast met de gewone differentiaalvergelijkingen voor functies $u(x)$ van één variabele). 't' zal slaan op de tijdsvariabele, ' \vec{x} ' slaat hier op de ruimtelijke variabelen. In eerste instantie beperken we ons hier tot 1D problemen ($\vec{x} = x$), op het einde van het hoofdstuk behandelen we ook nog een 2D probleem.

In het bijzonder beschouwen we twee types lineaire PDVs¹:

- De warmtevergelijking:

$$\boxed{\partial_t u(x, t) = \alpha^2 \partial_x^2 u(x, t)} \quad x \in [a, b] \quad t \in [0, +\infty[\quad (7.1.1)$$

- De golfvergelijking:

$$\boxed{\partial_t^2 u(x, t) = c^2 \partial_x^2 u(x, t)} \quad x \in [a, b] \quad t \in [0, +\infty[\quad (7.1.2)$$

Randvoorwaarden. Voor elk van deze vergelijkingen zullen we randvoorwaarden op begin- en eindpunt van ons interval stellen. In het bijzonder beschouwen we twee types randvoorwaarden. Een **Dirichlet randvoorwaarde** stelt een voorwaarde op de functie u op een bepaald randpunt (bvb. a), terwijl een **Neumann randvoorwaarde** een voorwaarde stelt op de ruimtelijke afgeleide $\partial_x u$ op een randpunt:

$$\begin{aligned} \text{Dirichlet:} \quad & u(a, t) = u_a \quad t \in [0, +\infty[\\ \text{Neumann:} \quad & \partial_x u(x, t)|_{x=a} = J_a \quad t \in [0, +\infty[\end{aligned} \quad (7.1.3)$$

Wanneer $u_a = 0$ of $J_a = 0$ spreken we respectievelijk over een **homogene** Dirichlet of Neumann randvoorwaarde. Voor $u_a \neq 0$ of $J_a \neq 0$ spreken we respectievelijk over een **inhomogene** Dirichlet of Neumann randvoorwaarde.

¹De hier besproken methodes zijn ook onmiddellijk te veralgemenen naar de Schrödinger vergelijking van de kwantumfysica: $i\hbar\partial_t u = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta u$, waarbij de (complexe) $u(\vec{x}, t)$ dan de waarschijnlijkheidsgolf van het vrije elektron beschrijft.

Beginvoorwaarden. Tot slot zullen we beginvoorwaarden stellen. Voor de warmtevergelijking (eerste orde in t) hebben we enkel een voorwaarde op de initiële waarde van u , terwijl we voor de golfvergelijking (tweede orde in t) zowel een voorwaarde hebben op u als op de eerste tijdsafgeleide $\partial_t u$:

$$\text{beginvw. warmtevergelijking:} \quad u(x, 0) = f(x) \quad x \in [a, b] \quad (7.1.4)$$

$$\text{beginvw. golfvergelijking:} \quad \begin{cases} u(x, 0) = f(x) & x \in [a, b] \\ \partial_t u(x, t)|_{t=0} = g(x) & x \in [a, b] \end{cases} .$$

7.2 Fysische betekenis

Warmtevergelijking

Zoals we op het einde van hoofdstuk 4 bespreken (§4.4.3), volgt de warmtevergelijking

$$\partial_t u(\vec{x}, t) = \alpha^2 \nabla u(\vec{x}, t), \quad (7.2.5)$$

uit de continuïteitsvergelijking, met stroomdichtheid $\vec{j} = -\lambda \vec{\nabla} u$. Voor een warmtegeleider zal $u(\vec{x}, t) = T(\vec{x}, t)$ slaan op de positie- en tijdsafhankelijke temperatuur. In een deeltjesdiffusieproces zal $u(\vec{x}, t) = n(\vec{x}, t)$ slaan op de lokale deeltjesdichtheid. De (dimensie-afhankelijke) Laplacian leest:

$$\Delta = \sum_{i=1}^D \partial_{x_i}^2 \quad (7.2.6)$$

In het bijzonder zullen we warmtegeleiding of deeltjesdiffusie doorheen een dunne, rechte en geïsoleerde buis beschouwen, wat zich tot een effectief 1D probleem herleidt, waarbij we dan inderdaad (7.1.1) krijgen.

Wat de **randvoorwaarden** betreft komen voor de 1D warmtegeleider Dirichlet randvoorwaarden overeen met de situatie waarbij het uiteinde van de geleider contact maakt met een warmtereservoir op temperatuur $T_a = u_a$. Voor een diffusieproces komt de Dirichlet randvoorwaarde overeen met de situatie waarbij het uiteinde uitmondt in een deeltjesreservoir met constante dichtheid $n_a = u_a$. De Neumann randvoorwaarde geeft op zijn beurt een voorwaarde op de stroom. Voor de warmtegeleider komt $J_a = 0$ (de 'geen-stroom-voorwaarde' = homogene Neumann randvoorwaarde) dan overeen met de situatie waarbij het uiteinde volledig geïsoleerd van de omgeving is, voor het diffusieproces komt dit overeen met een afgesloten buiseinde. $J_a = \pm j_a/D$ (met $D = \alpha^2$ de diffusieconstante) komt bij een diffusieproces dan overeen met de injectie van deeltjes in het systeem aan een snelheid van j_a deeltjes per seconde.

Golfvergelijking

De golfvergelijking:

$$\partial_t^2 u(\vec{x}, t) = c^2 \Delta u(\vec{x}, t), \quad (7.2.7)$$

is van toepassing op tal van golfffenomenen, waarbij er een (min-of-meer constante) golfsnelheid c is. We vermelden hier bijvoorbeeld drukgolven in een vloeistof/gas (=geluid), elektromagnetische golven (=licht/straling), of ook elastische golven in een bepaald materiaal. In dit laatste geval zal $u(\vec{x}, t)$ een uitrekking t.o.v. de lokale rustpositie beschrijven. Bvb. voor een snaar of drum, zal u overeenkomen met de loodrechte uitwijking van de snaar of het drumvel. Voor het 1D geval (bvb. de snaar) reduceert deze vergelijking zich tot (7.1.2).

Als randvoorwaarden in het 1D geval zullen we nu typisch homogene Dirichlet randvoorwaarden (= gespannen snaar, ook nog genoemd: een snaar met 'vast uiteinde') of homogene Neumann randvoorwaarden (= snaar waarvan het uiteinde via een lus rond een staaf, vrij verticaal kan bewegen, ook nog een snaar met 'vrij uiteinde' genoemd) nemen. Zoals we hieronder aantonen, komt voor het geval van geluidsgolven in een buis (i.e. een blaasinstrument) de homogene Dirichlet randvoorwaarde overeen met een open buiseinde (constante druk), en komt de homogene Neumann voorwaarde overeen met een gesloten buiseinde (verdwijnende luchtstroom).

Geluidsgolven. De golfvergelijking voor geluidsgolven volgt uit de continuïteitsvergelijking (4.2.23) en de Navier-Stokes vergelijking (4.2.24) voor $\mu = 0$ en $\vec{g} = 0$. Hierbij beschouwt men kleine dichtheid- en drukfluctuaties, $\tilde{\rho}$ en \tilde{p} ten opzichte van een constante dichtheid ρ_0 en druk p_0 :

$$\rho = \rho_0 + \tilde{\rho} \quad p = p_0 + \tilde{p}, \quad (7.2.8)$$

en beschouwt men ook het snelheidsveld \vec{v} als klein. Bovendien hebben we dat de druk via een bepaalde toestandsvergelijking afhangt van de dichtheid: $p = f(\rho)$. Toon nu zelf aan als **oefening** dat de linearisatie van (4.2.23) en (4.2.24) in $\tilde{\rho}, \tilde{p}$ en \vec{v} kan geschreven worden als:

$$\partial_t \tilde{\rho} + \rho_0 \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \quad (7.2.9)$$

$$\rho_0 \partial_t \vec{v} = -f'(\rho_0) \vec{\nabla} \tilde{\rho}. \quad (7.2.10)$$

Uit deze vergelijkingen volgt verder (**oefening**):

$$\partial_t^2 \tilde{\rho} = f'(\rho_0) \Delta \tilde{\rho}, \quad (7.2.11)$$

wat precies de golfvergelijking is, met als golfsnelheid (= geluidssnelheid):

$$c = \sqrt{f'(\rho_0)} = \left(\frac{dp(\rho)}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_0} \right)^{1/2}. \quad (7.2.12)$$

Voor een lange buis gevuld met lucht krijgen we de 1D versie van (7.2.9) en (7.2.10). Een gesloten buiseinde, impliceert als randvoorwaarde dat de luchtverplaatsing verdwijnt, $v(a) = 0$, wat via (7.2.10) betekent dat $\tilde{p}' \propto \tilde{\rho}' = 0$ (Neumann randvoorwaarde voor (7.2.11)). Voor een open buiseinde verdwijnt de drukfluctuatie $\tilde{p}(a) \propto \tilde{\rho}(a) = 0$ (Dirichlet randvoorwaarde).

7.3 Oplossing 1D warmtevergelijking

De oplossingsstrategie die we in dit hoofdstuk voor de verschillende vergelijkingen bespreken, steunt op de **scheiding der veranderlijken**. Dit laat ons toe om de **normale modes** te vinden, als algemene oplossingen die voldoen aan de homogene randvoorwaarden. Na eventuele verwerking van de inhomogene randvoorwaarden wordt de specifiek gezochte oplossing die voldoet aan de beginvoorwaarde dan gevonden als een bepaalde reekssom van normale modes. We leggen deze strategie hier stap voor stap uit voor de 1D warmtevergelijking:

Stap 1: Scheiding der veranderlijken

Als eerste stap bij het zoeken van een oplossing van een PDV is het algemeen een goed idee om een scheiding der veranderlijken te proberen. Concreet voor de 1D warmtevergelijking:

$$\partial_t u(x, t) = \alpha^2 \partial_x^2 u(x, t) \quad x \in [0, L], \quad t \in [0, \infty[, \quad (7.3.13)$$

stellen we een oplossing van de vorm

$$u(x, t) = X(x)T(t), \quad (7.3.14)$$

voorop. Substitutie in (7.3.13) geeft dan:

$$X(x)T'(t) = \alpha^2 X''(x)T(t) \Rightarrow \frac{T'(t)}{T(t)} = \alpha^2 \frac{X''(x)}{X(x)}. \quad (7.3.15)$$

Het is dan duidelijk dat beide leden van deze laatste gelijkheid noch van x en noch van t mogen afhangen. Zodoende vinden we:

$$\frac{T'(t)}{T(t)} = \alpha^2 \frac{X''(x)}{X(x)} = \alpha^2 \sigma, \quad (7.3.16)$$

met σ een bepaalde constante, de zogenaamde *scheidingsconstante*. Zo valt de warmtevergelijking dus uiteen in twee afzonderlijke vergelijkingen voor $X(x)$ en $T(t)$:

$$\boxed{X''(x) = \sigma X(x)}, \quad (7.3.17)$$

$$\boxed{T'(t) = \alpha^2 \sigma T(t)}. \quad (7.3.18)$$

Stap 2: Bepaling normale modes

Bemerkt dat als $X(x)$ voldoet aan bepaalde homogene randvoorwaarden, $u(x, t)(= X(x)T(t))$ dan voldoet aan dezelfde homogene randvoorwaarden. We gaan daarom eerst op zoek naar oplossingen $X(x)$ van (7.3.17) die *vóór bepaalde waarden* van σ voldoen aan de homogene randvoorwaarden. Men spreekt hier over een *eigenwaardenprobleem*.

Concreet beschouwen we hier homogene Dirichletrandvoorwaarden² aan beide randen (bemerkt dat we $a = 0$ en $b = L$ nemen voor de randpunten):

$$X(0) = X(L) = 0. \quad (7.3.19)$$

A priori onderscheiden we drie kwalitatief verschillende mogelijkheden:

- $\sigma > 0$

In dat geval hebben we (zie § 1.3 uit hoofdstuk 1) de algemene oplossing:

$$X(x) = c_1 e^{\sqrt{\sigma}x} + c_2 e^{-\sqrt{\sigma}x}, \quad (7.3.20)$$

en je kan makkelijk zelf aantonen dat de randvoorwaarden (7.3.19) dan impliceren dat $c_1 = c_2 = 0$, er bestaat dus geen niet-triviale oplossing ($X(x) \neq 0$).

- $\sigma = 0$

In dat geval hebben we de algemene lineaire oplossing:

$$X(x) = c_1 + c_2 x, \quad (7.3.21)$$

en opnieuw kan je makkelijk aantonen dat er geen niet-triviale oplossing bestaat die voldoet aan de homogene Dirichlet randvoorwaarden (7.3.19).

- $\sigma < 0$

Nu hebben we als algemene oplossing:

$$X(x) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx), \quad (7.3.22)$$

met $\sigma = -k^2$. De eerste randvoorwaarde $X(0) = 0$ impliceert onmiddellijk dat $c_1 = 0$. De tweede randvoorwaarde $X(L) = 0$ leest dan, $c_2 \sin(kL) = 0$. Hieruit volgt dat $c_2 = 0$ tenzij(!) $kL = \pi n$ met $n \in \mathbb{N}^+$. We vinden dus als niet-triviale oplossingen van (7.3.17) die voldoen aan de Dirichlet-randvoorwaarden (7.3.19):

$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (7.3.23)$$

horende bij $\sigma_n = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$.

Gegeven zo'n oplossing $X_n(x)$ vinden we de bijhorende $T_n(t)$ dan als oplossing van (7.3.18) met $\sigma = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$:

$$T'_n(t) = \alpha^2 \sigma_n T_n(t), \quad (7.3.24)$$

waaruit dan:

$$T_n(t) = e^{-\left(\frac{n\pi\alpha}{L}\right)^2 t}. \quad (7.3.25)$$

²In het volgende voorbeeld en in de bord/werkcolleges zullen andere randvoorwaarden aan bod komen.

Nemen we de oplossingen voor X_n en T_n samen dan vinden we uiteindelijk de zogenaamde **normale modes**:

$$u_n(x, t) = X_n(x)T_n(t) = e^{-(\frac{n\pi\alpha}{L})^2 t} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 1, 2, \dots). \quad (7.3.26)$$

De meest algemene oplossing van de warmtevergelijking (7.3.13) die voldoet aan de homogene Dirichlet randvoorwaarden vinden we dan als algemene lineaire combinatie - of nog: *superpositie* - van deze normale modes³:

$$u_h(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} s_n u_n(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} s_n e^{-(\frac{n\pi\alpha}{L})^2 t} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (7.3.27)$$

met s_1, s_2, \dots bepaalde reële constantes.

Stap 2 bis: Verwerking van (eventuele) inhomogene randvoorwaarden

De algemene oplossing $u_h(x, t)$ voor bepaalde homogene randvoorwaarden kan makkelijk worden uitgebreid naar de algemene oplossing $u(x, t)$ voor de corresponderende inhomogene randvoorwaarden. Concreet, voor het geval dat we hier behandelen van Dirichlet randvoorwaarden links en rechts, lezen dergelijke inhomogene randvoorwaarden:

$$u(0, t) = T_1 \quad , \quad u(L, t) = T_2, \quad (7.3.28)$$

voor bepaalde constanten $T_1, T_2 \neq 0$. We stellen dan de particuliere lineaire (tijdsonafhankelijke) functie:

$$\tilde{u}(x) = (1 - \frac{x}{L})T_1 + \frac{x}{L}T_2, \quad (7.3.29)$$

welke duidelijk een oplossing vormt van de 1D warmtevergelijking ($\partial_t \tilde{u} = \partial_x^2 \tilde{u} = 0$), die voldoet aan de inhomogene (Dirichlet) randvoorwaarden (7.3.28). Voor de meest algemene oplossing $u(x, t)$ die voldoet aan deze inhomogene randvoorwaarden geldt dan onmiddellijk dat $u(x, t) - \tilde{u}(x)$ de meest algemene oplossing vormt die voldoet aan de homogene randvoorwaarden, of dus:

$$u(x, t) = \tilde{u}(x) + u_h(x, t), \quad (7.3.30)$$

expliciet uitgeschreven leest dit:

$$u(x, t) = (1 - \frac{x}{L})T_1 + \frac{x}{L}T_2 + \sum_{n=1}^{\infty} s_n e^{-(\frac{n\pi\alpha}{L})^2 t} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (7.3.31)$$

³Je ziet onmiddellijk dat elke lineaire combinatie van oplossingen opnieuw een oplossing vormt van de warmtevergelijking. Hoe weten we dan dat (7.3.27) de meest algemene oplossing vormt voor de gestelde randvoorwaarden? Wel, op een bepaald tijdstip (bvb. $t = 0$) heeft het rechterlid de uitdrukking van een Fourier(sinus)reeks, en zoals we uit hoofdstuk 6 weten, kan elke (stuksgewijs) gladde functie voor $x \in [0, L]$ worden voorgesteld door dergelijke convergerende reeks. Als dusdanig vat (7.3.27) dus elke (stuksgewijs gladde) beginvoorwaarde $u(x, 0) = f(x)$ (zie ook stap 4). Uit de afleiding in stappen 1 en 2 volgt dan verder dat de tijdsafhankelijkheid $\propto e^{-(\frac{n\pi\alpha}{L})^2 t}$ van de Fouriercoëfficiënten volledig bepaald wordt uit de eis dat $u(x, t)$ inderdaad een oplossing is.

Stap 3: Verwerking van beginvoorwaarde

Tot slot bepalen we nog de vrije coëfficiënten s_1, s_2, \dots in de algemene oplossing (7.3.31) uit de beginvoorwaarde $u(x, 0) = f(x)$. Hiertoe herschijven we deze beginvoorwaarde als: $u_h(x, 0) = f(x) - \tilde{u}(x)$, of expliciet:

$$\sum_{n=1}^{\infty} s_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = f(x) - \tilde{u}(x). \quad (7.3.32)$$

De coëfficiënten s_n volgen dan uit toepassing van de orthogonaliteitsrelaties (6.1.14). In het bijzonder gebruiken we hier (7.3.35) (zie § 'orthogonaliteitsrelaties' hieronder), om te schrijven:

$$\langle \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right), f(x) - \tilde{u}(x) \rangle = \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) (f(x) - \tilde{u}(x)) = \frac{L}{2} s_n \quad (7.3.33)$$

$$\Rightarrow \boxed{s_n = \frac{2}{L} \langle \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right), f(x) - \tilde{u}(x) \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) (f(x) - \tilde{u}(x))}. \quad (7.3.34)$$

Orthogonaliteitsrelaties

Ter referentie geven we hier de verschillende orthogonaliteitsrelaties (met m, n gehele getallen) die van pas komen bij het bepalen van de coëfficiënten s_n in de reeksoplossingen van de warmte- en golfvergelijking (ga zelf na dat deze allen volgen uit (6.1.14)!).

$$\langle \sin\left(\frac{\pi m}{L}x\right), \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \rangle = \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi m}{L}x\right) \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) = \frac{L}{2} \delta_{m,n}, \quad m \neq 0, \quad (7.3.35)$$

$$\langle \cos\left(\frac{\pi m}{L}x\right), \cos\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \rangle = \int_0^L dx \cos\left(\frac{\pi m}{L}x\right) \cos\left(\frac{\pi n}{L}x\right) = \begin{cases} \frac{L}{2} \delta_{m,n}, & m \neq 0 \\ L, & m = n = 0 \end{cases}, \quad (7.3.36)$$

$$\langle \sin\left(\frac{\pi(1+2m)}{2L}x\right), \sin\left(\frac{\pi(1+2n)}{2L}x\right) \rangle = \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi(1+2m)}{2L}x\right) \sin\left(\frac{\pi(1+2n)}{2L}x\right) = \frac{L}{2} \delta_{m,n}, \quad (7.3.37)$$

$$\langle \cos\left(\frac{\pi(1+2m)}{2L}x\right), \cos\left(\frac{\pi(1+2n)}{2L}x\right) \rangle = \int_0^L dx \cos\left(\frac{\pi(1+2m)}{2L}x\right) \cos\left(\frac{\pi(1+2n)}{2L}x\right) = \frac{L}{2} \delta_{m,n}, \quad (7.3.38)$$

Als illustratie schrijven we expliciet de reeksoplossing neer met Dirichlet randvoorwaarden ($u(0, t) = T_1$ en $u(L, t) = T_2$) en beginvoorwaarde

$$u(x, 0) = f(x) \begin{cases} = T_1 & x \in [0, L/2] \\ = T_2 & x \in [L/2, L] \end{cases}. \quad (7.3.39)$$

Uit (7.3.34) vinden we:

$$s_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) \left(\theta\left(\frac{L}{2} - x\right)T_1 + \theta\left(x - \frac{L}{2}\right)T_2 + (T_1 - T_2)\frac{x}{L} - T_1 \right),$$

(met $\theta(x)$ de Heaviside stapfunctie, $\theta(x) = 1$ voor $x \geq 0$, $\theta(x) = 0$ voor $x < 0$), waaruit uiteindelijk:

$$\begin{aligned} s_{2n+1} &= 0 \\ s_{2n} &= (T_2 - T_1) \frac{(-1)^n}{n\pi}, \end{aligned} \quad (7.3.40)$$

resulterend in de expansie (7.3.31) voor $u(x, t)$:

$$u(x, t) = T_1\left(1 - \frac{x}{L}\right) + T_2\frac{x}{L} + (T_2 - T_1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n\pi} e^{-(\alpha\frac{2\pi n}{L})^2 t} \sin\left(\frac{2\pi n}{L}x\right). \quad (7.3.41)$$

In fig.7.1(a) tonen we de bekomen oplossing voor specifieke waarden van T_1, T_2, L . Bemerк dat de gevonden oplossing $u(x, t)$ **voor grote t tijdsonafhankelijk** wordt. Dit is ook wat we fysisch verwachten van een (warmte-)diffusieproces, na voldoende tijd wordt een evenwichtsconfiguratie bereikt. In de oplossing (7.3.31) manifesteert dit zich in het exponentiële verval van de pre-factor bij de modes $\propto \sin(\frac{\pi n}{L}x)$. De stationaire oplossing die overblijft is de particulier oplossing $\tilde{u}(x)$:

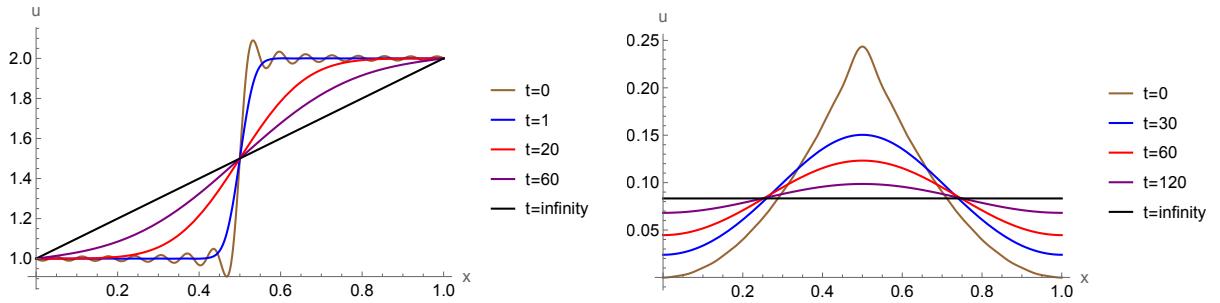
$$u(x, t) \xrightarrow{\lim_{t \rightarrow \infty}} \tilde{u}(x). \quad (7.3.42)$$

De tijdsschaal t_e waarover het evenwicht bereikt wordt, volgt dan uit de traagst afneemende exponentieel die in de expansie verschijnt. Voor het voorbeeld (7.3.41) is dit $e^{-(\alpha\frac{2\pi}{L})^2 t}$, waaruit $t_e \gtrsim (\frac{L}{2\pi\alpha})^2$. Algemeen zal deze tijdsschaal schalen als $(L/\alpha)^2$, met L de lengte van de geleider en α^2 de warmtecoëfficiënt. Ook deze schaling komt fysisch precies overeen met *diffusieve propagatie*.

Het exponentiële verval van de modes $\propto e^{-(\alpha\frac{\pi n}{L})^2 t}$ zorgt er ook voor dat voor groeiende t de reeks steeds sneller convergeert. In het bijzonder worden voor elke positieve t de hogere-orde coëfficienten gedempt, wat verklaart waarom het Gibbs fenomeen in figuur 7.1 (a) onmiddellijk verdwijnt.

7.3.1 Voorbeeldoefening

Beschouw een staaf van lengte L met een bepaalde warmtecoëfficiënt α^2 die aan elk van de uiteinden geïsoleerd is (= homogene Neumann randvoorwaarden). De initiële temperatuursverdeling leest: $u(x, 0) = T_0(x) = f(x) = T_c(\frac{x}{L})^2$ in het interval $[0, L/2]$ en $u(x, 0) = T_0(x) = f(x) = T_c(1 - \frac{x}{L})^2$ in het interval $[L/2, L]$. Bepaal de de temperatuursevolutie $u(x, t)$ als een reeksontwikkeling in normale modes.



Figuur 7.1: (a) De reeks (7.3.41) getrunceerd tot op $n = 15$, voor $\alpha = 0.02$, $T_1 = 1$, $T_2 = 2$, $L = 1$. Bemerk de evolutie naar de x -afhankelijke evenwichtsconfiguratie $\tilde{u}(x)$ die lineair interpoleert tussen de twee vastgehouden temperaturen aan de uiteinden. Bemerk ook het Gibbs-fenomeen voor de reeksbenadering op $t = 0$ wanneer de exacte $u(x, t)$ discontinu is voor $x = L/2$. Deze discontinuitéit verdwijnt onmiddellijk voor $t > 0$, waardoor de volgende reeksbenaderingen veel beter convergeren. (b) De reeks (7.3.58) getrunceerd tot op $m = 15$, voor $\alpha = 0.02$, $T_c = 1$, $L = 1$. Voor de geïsoleerde warmtegeleider evolueert de temperatuur $u(x, t)$ geleidelijk aan naar een constante verdeling $\lim_{t \rightarrow \infty} u(x, t) = s_0 = T_c/12$.

Stap 1: Scheiding der veranderlijken

Dit verloopt identiek als hierboven, we vinden (zie (7.3.17) en (7.3.18)):

$$X''(x) = \sigma X(x), \quad (7.3.43)$$

$$T'(t) = \alpha^2 \sigma T(t). \quad (7.3.44)$$

Stap 2: Bepaling normale modes

Nu hebben we **homogene Neumann randvoorwaarden**, die zich opnieuw doorzetten naar $X(x)$:

$$X'(0) = X'(L) = 0, \quad (7.3.45)$$

met opnieuw de drie kwalitatief verschillende mogelijkheden:

- $\sigma > 0$

In dat geval hebben we (zie § 1.3 uit hoofdstuk 1) de algemene oplossing:

$$X(x) = c_1 e^{\sqrt{\sigma}x} + c_2 e^{-\sqrt{\sigma}x}, \quad (7.3.46)$$

en de randvoorwaarden (7.3.45) zullen opnieuw impliceeren dat $c_1 = c_2 = 0$, er bestaat dus geen niet-triviale oplossing ($X(x) \neq 0$).

- $\sigma = 0$

In dat geval hebben we de algemene lineaire oplossing:

$$X(x) = c_1 + c_2 x. \quad (7.3.47)$$

In tegenstelling tot in het (Dirichlet) geval van hierboven, bestaat er nu wel een niet-triviale oplossing. Uit $X'(0) = 0$ volgt $c_2 = 0$, waardoor we meteen ook hebben dat $X'(L) = 0$. Zo vinden we als niet-triviale oplossing van (7.3.43) horende bij $\sigma = 0$:

$$X(x) = 1. \quad (7.3.48)$$

- $\sigma < 0$

Hier hebben we de algemene oplossing:

$$X(x) = c_1 \cos(kx) + c_2 \sin(kx), \quad (7.3.49)$$

met $\sigma = -k^2$. De eerste randvoorwaarde $X'(0) = 0$ impliceert onmiddellijk dat $c_2 = 0$. De tweede randvoorwaarde $X'(L) = 0$ leest dan: $-kc_1 \sin(kL) = 0$. Hieruit volgt dat $c_1 = 0$, tenzij $kL = \pi n$ met $n \in \mathbb{N}^+$.

Samengevat vinden we dus als niet-triviale oplossingen van (7.3.43) die voldoen aan de Neumann-randvoorwaarden (7.3.45) (bemerkt dat we starten bij $n = 0$, overeenkomend met de constante oplossing (7.3.48)):

$$X_n(x) = \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 0, 1, \dots), \quad (7.3.50)$$

horende bij $\sigma_n = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$.

Gegeven zo'n oplossing $X_n(x)$ vinden we de bijhorende $T_n(t)$ dan als oplossing van (7.3.44) met $\sigma = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$:

$$T'_n(t) = \alpha^2 \sigma_n T_n(t), \quad (7.3.51)$$

waaruit:

$$T_n(t) = e^{-\left(\frac{n\pi\alpha}{L}\right)^2 t} \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (7.3.52)$$

Nemen we de oplossingen voor X_n en T_n samen dan vinden we uiteindelijk de normale modes:

$$u_n(x, t) = X_n(x)T_n(t) = e^{-\left(\frac{n\pi\alpha}{L}\right)^2 t} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (7.3.53)$$

En de meest algemene oplossing van de warmtevergelijking (7.3.13) die voldoet aan de homogene Neumann randvoorwaarden vinden we dan als reeksontwikkeling in deze normale modes:

$$u(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} s_n u_n(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} s_n e^{-\left(\frac{n\pi\alpha}{L}\right)^2 t} \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right), \quad (7.3.54)$$

met s_0, s_1, s_2, \dots bepaalde reële constantes.

Stap 3: verwerking van beginvoorwaarde

De beginvoorwaarde leest $u(x, 0) = f(x)$, of expliciet:

$$\sum_{n=0}^{\infty} s_n \cos\left(\frac{n\pi}{L}x\right) = f(x) = T_c\left(\frac{x}{L}\right)^2 \theta(L/2 - x) + T_c\left(1 - \frac{x}{L}\right)^2 \theta(x - L/2). \quad (7.3.55)$$

De coëfficiënten s_n volgen dan uit toepassing van de cosinus orthogonaliteitsrelaties (7.3.36). Enerzijds hebben we dan:

$$s_0 = \frac{1}{L} \int_0^L dx f(x) = \frac{T_c}{12}. \quad (7.3.56)$$

Anderzijds ⁴:

$$\begin{aligned} s_{2m+1} &= \frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \cos\left(\frac{\pi(2m+1)}{L}x\right) = 0 \\ s_{2m} &= \frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \cos\left(\frac{\pi(2m)}{L}x\right) = T_c \frac{(-1)^m}{m^2 \pi^2} \end{aligned} \quad (7.3.57)$$

Dit levert de gezochte expansie op voor $u(x, t)$:

$$u(x, t) = T_c \left(\frac{1}{12} + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m^2 \pi^2} e^{-(\alpha \frac{2\pi m}{L})^2 t} \cos\left(\frac{2\pi m}{L}x\right) \right) \quad (7.3.58)$$

In figuur 7.1 (b) tonen we de evolutie van $u(x, t)$ (getrunceerd tot op $m = 15$).

7.4 Oplossing 1D golfvergelijking

De oplossingsmethode voor de 1D golfvergelijking loopt heel gelijkaardig als deze voor de 1D warmtevergelijking (vorige sectie). We doorlopen de verschillende stappen.

Stap 1: Scheiding der veranderlijken

De op te lossen vergelijking leest nu:

$$\partial_t^2 u(x, t) = c^2 \partial_x^2 u(x, t) \quad x \in [0, L], \quad t \in [0, \infty[, \quad (7.4.59)$$

en we stellen hiervoor opnieuw een oplossing van de vorm

$$u(x, t) = X(x)T(t), \quad (7.4.60)$$

⁴Voor algemene $n \in \mathbb{R}$ geeft de evaluatie van de integraal: $\frac{2}{L} \int_0^L dx f(x) \cos\left(\frac{\pi n}{L}x\right) = 2T_c \frac{(-2 \sin(n\pi) + 2n\pi \cos(n\pi/2))}{(n\pi)^3}$, waaruit de uitdrukkingen (7.3.57) volgen. Je kan zelf ook zonder expliciete berekening aantonen uit het even karakter van $f(x)$, $f(x) = f(L - x)$, dat algemeen de coëfficiënten voor oneven $n = 2m + 1$ verdwijnen, $s_{2m+1} = 0$.

voorop. Substitutie in (7.4.59) geeft dan:

$$X(x)T''(t) = c^2 X''(x)T(t) \Rightarrow \frac{T''(t)}{T(t)} = c^2 \frac{X''(x)}{X(x)}. \quad (7.4.61)$$

Het is dan duidelijk dat beide leden van deze laatste vergelijking noch van x en noch van t mogen afhangen. Zodoende vinden we:

$$\frac{T''(t)}{T(t)} = c^2 \frac{X''(x)}{X(x)} = c^2 \sigma, \quad (7.4.62)$$

met scheidingsconstante σ . Zo valt de golfvergelijking uiteen in twee afzonderlijke vergelijkingen voor $X(x)$ en $T(t)$:

$$\boxed{X''(x) = \sigma X(x)}, \quad (7.4.63)$$

$$\boxed{T''(t) = c^2 \sigma T(t)}. \quad (7.4.64)$$

Stap 2: Bepaling normale modes

We gaan eerst op zoek naar oplossingen $X(x)$ van (7.4.59) voor bepaalde waarden van σ , zodat deze oplossingen voldoen aan de homogene randvoorwaarden. Concreet beschouwen we hier, net als bij het eerste voorbeeld voor de warmtevergelijking, **homogene Dirichletrandvoorwaarden** aan beide randen:

$$X(0) = X(L) = 0, \quad (7.4.65)$$

waaruit dan (zie (7.3.20)-(7.3.23)) de niet-triviale oplossingen volgen:

$$X_n(x) = \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 1, 2, \dots), \quad (7.4.66)$$

horende bij $\sigma_n = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$.

Gegeven zo'n oplossing $X_n(x)$ vinden we de bijhorende $T_n(t)$ dan als oplossing van (7.4.64) met $\sigma = -\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2$:

$$T_n''(t) = c^2 \sigma_n T_n(t), \quad (7.4.67)$$

waaruit dan:

$$T_n(t) = s_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + t_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right). \quad (7.4.68)$$

Bemerk dat de vergelijking voor T_n nu een tweede-orde differentiaalvergelijking is, in tegenstelling tot de eerste-orde vergelijking die we krijgen bij de warmtevergelijking. Hierdoor is de algemene oplossing een lineaire combinatie van twee oplossing ($\propto \cos$ en $\propto \sin$). We schrijven hier al algemene constantes s_n en t_n , deze zullen dan door de beginvoorwaarden worden bepaald (zie stap 3).

Nemen we de oplossingen voor X_n en T_n samen, dan vinden we uiteindelijk de normale modes:

$$\boxed{u_n(x, t) = X_n(x)T_n(t) = \left(s_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + t_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right)\right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (n = 1, 2, \dots)}, \quad (7.4.69)$$

en de meest algemene oplossing van de golfvergelijking (7.4.59) die voldoet aan de homogene Dirichlet randvoorwaarden vinden we dan als een expansie in deze normale modes:

$$\boxed{u(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(s_n \cos\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) + t_n \sin\left(\frac{cn\pi}{L}t\right) \right) \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right),} \quad (7.4.70)$$

met $s_1, s_2, \dots, t_1, t_2, \dots$ bepaalde reële constantes.

We houden het hier concreet overigens bij homogene randvoorwaarden, zodat er geen inhomogene randvoorwaarden moeten worden verwerkt.

Stap 3: verwerking van beginvoorwaarden

Tot slot verwerken we nog de beginvoorwaarden

$$u(x, 0) = f(x) \quad \partial_t u(x, t)|_{t=0} = g(x). \quad (7.4.71)$$

Na invullen van (7.4.70) lezen deze respectievelijk:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} s_n \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (7.4.72)$$

$$g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} t_n \frac{cn\pi}{L} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (7.4.73)$$

De coëfficiënten s_1, s_2, \dots en t_1, t_2, \dots volgen dan uit toepassing van de orthogonaleitelsrelaties, in het bijzonder (7.3.35):

$$\begin{aligned} s_n &= \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) f(x), \\ t_n &= \frac{2}{cn\pi} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right) g(x). \end{aligned} \quad (7.4.74)$$

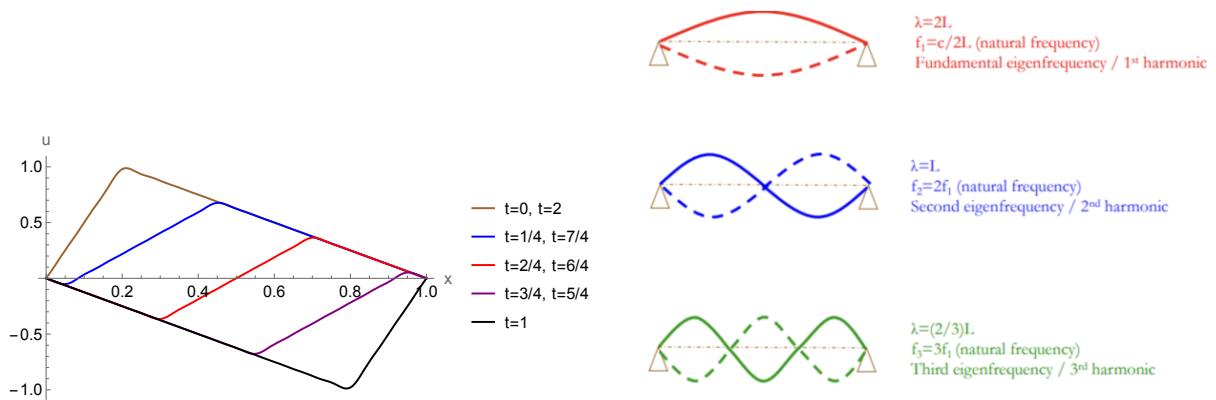
Als concreet voorbeeld beschouwen we een gespannen snaar (=homogene Dirichlet randvoorwaarden aan beide eindpunten) met lengte L die we op $t = 0$ uit rust loslaten, met initieel profiel $u(x, 0) = f(x) = 5h\frac{x}{L}$ voor $x < L/5$ en $u(x, 0) = f(x) = \frac{5}{4}h(1 - \frac{x}{L})$ voor $x \geq L/5$.

Initiële rust vertaalt zich naar $g(x) = 0$ en dus ook $t_n = 0$. De coëfficiënten s_n vinden we als:

$$s_n = \frac{2}{L} \int_0^L dx \sin\left(\frac{\pi n\pi}{L}x\right) \left(\frac{5x}{L}h\theta\left(\frac{L}{5} - x\right) + \frac{5}{4}h(1 - \frac{x}{L})\theta(x - \frac{L}{5}) \right) = \frac{25h}{2} \frac{\sin(\frac{n\pi}{5})}{n^2\pi^2}. \quad (7.4.75)$$

Hieruit volgt dan de oplossing (zie ook figuur 7.2 (a)):

$$u(x, t) = \frac{25h}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(\frac{n\pi}{5})}{n^2\pi^2} \cos\left(\frac{c\pi n}{L}t\right) \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right). \quad (7.4.76)$$



Figuur 7.2: (a) De reeksoplossing (7.4.76) voor een trillende snaar, getrunceerd tot op $n = 30$, voor $c = h = L = 1$. Zoals verwacht is de oplossing periodiek met periode $T = \frac{1}{f_1} = \frac{2L}{c} = 2$. Zie de clip The motion of a plucked string voor een slow-motion opname van een trillende snaar met een beginvoorwaarde van dezelfde vorm. (b) De eerste drie normale moden ($n = 1, 2, 3$), met golflengtes (λ in figuur) $L_n = 2L, L, \frac{2}{3}L$ en frequenties $f_n = \frac{c}{2L}, \frac{c}{L}, \frac{3c}{2L}$.

Normale moden, eigenfrequenties en resonantie.

De individuele normale moden $\propto \cos\left(\frac{c\pi n}{L}t\right) \sin\left(\frac{\pi n}{L}x\right)$ in de reeksexpansie (7.4.76), vormen staande golven (zie figuur 7.2 (b)). Dit is algemeen zo voor de normale moden van de golfvergelijking, men spreekt ook over de eigenmoden. Deze golven hebben bepaalde **eigenfrequenties** f_n .

Specifiek voor het 1D geval is dat al de eigenfrequenties f_n een geheel veelvoud zijn van de laagste frequentie f_1 . Men spreekt over de grondtoon (frequentie f_1) en de hogere orde harmonieken (frequenties f_n ($n > 1$)). Zo vinden we hier dus in het geval van Dirichlet randvoorwaarden: $f_n = \frac{cn}{2L}$ en corresponderende golfengtes $L_n = \frac{c}{f_n} = \frac{2L}{n}$. Vertalen we dit naar geluid dan komt dergelijk spectrum overeen met een zuivere toon. En dit is dan ook de reden waarom muziekinstrumenten (gitaar, piano, blaasinstrumenten) die een zuivere toon genereren een 1D karakter hebben, in tegenstelling tot bijvoorbeeld de drum die voldoet aan de 2D golfvergelijking. Verder hangt de klankkleur van een toon af van de relatieve verhouding van de verschillende harmonieken. Uit de bovenstaande analyse volgt dus dat de klankkleur geproduceerd door een snaarinstrument ook afhangt van de precieze manier waarop de snaar aangeslagen wordt (wat elke gitarist uiteraard al wist).

In realiteit zal er door dissipatieve effecten in de meeste systemen een demping optreden van de verschillende normale moden - een aangeslagen gitaarsnaar blijft niet eeuwig trillen. Dit fenomeen hebben we ook gezien voor de gedempte harmonische oscillator in hoofdstuk 5 §5.3. In dat geval bestaat er slechts één mode met eigenfrequentie $\omega_0 = 2\pi f_0$, en vonden we naast de demping, ook het resonantiefenomeen veroorzaakt door een externe bron met frequentie $f \approx f_0$. Hier hebben we verschillende eigenfrequenties f_n en zal een externe bron **resonanties** veroorzaken, wanneer de frequentie resoneert met een of meer van deze eigenfrequenties $f \approx f_n$ (zie bijvoorbeeld

de clip Guitar that Plays itself).

7.5 2D golfvergelijking: de cirkelvormige drum

Tot slot van dit hoofdstuk beschouwen we de 2D golfvergelijking:

$$\partial_t^2 u(\vec{x}, t) = c^2 \Delta u(\vec{x}, t) \quad (7.5.77)$$

met

$$\vec{x} = (x, y) \quad \text{en} \quad \Delta = \partial_x^2 + \partial_y^2. \quad (7.5.78)$$

We zullen ons beperken tot het bepalen van de normale modes. Zoals hierboven besproken, geven deze modes ons de resonante frequenties en corresponderende trillingen van het medium. We stellen voor deze normale modes opnieuw een **scheiding der veranderlijken** die we in eerste instantie schrijven als:

$$u(\vec{x}, t) = A(x, y)T(t). \quad (7.5.79)$$

Substitutie in (7.5.77) resulteert dan in:

$$A(x, y)T''(t) = c^2 T(t) \Delta A(x, y) \Rightarrow \frac{T''(t)}{T(t)} = c^2 \frac{\Delta A(x, y)}{A(x, y)}, \quad (7.5.80)$$

waaruit we dan twee vergelijkingen vinden, met scheidingsconstante σ :

$$\Delta A(x, y) = \sigma A(x, y), \quad (7.5.81)$$

$$T''(t) = \sigma c^2 T(t). \quad (7.5.82)$$

Analoog als bij het 1D geval, zoeken we eerst oplossingen van (7.5.81), voor bepaalde scheidingsconstantes (=eigenwaarden) σ . De vorm van de oplossingen en de bijhorende eigenwaarden hangt sterk af van het gebied Ω waarover de golfvergelijking geldt, met bijhorende randvoorwaarden op de rand $\partial\Omega$. Hier nemen we het klassieke geval van een cirkelvormige drum (met straal R), met Dirichlet randvoorwaarden (=gespannen drumvel). Deze randvoorwaarden laten zich op een natuurlijke manier schrijven in polaire coördinaten $\vec{x}(\rho, \theta) = (\rho \cos \theta, \rho \sin \theta)$ ⁵:

$$A(R, \theta) = 0 \quad \text{voor} \quad \theta \in [0, 2\pi[\quad (7.5.83)$$

Het ligt dan ook voor de hand van voor de normale modes A_n als anzats opnieuw een scheiding der veranderlijken, ditmaal in ρ en θ , te gebruiken:

$$A(\rho, \theta) = F(\rho)G(\theta). \quad (7.5.84)$$

Substitutie in (7.5.81) levert dan, gebruik makende van de uitdrukking (3.1.22) voor de Laplacian in poolcoördinaten:

$$\left(\partial_\rho^2 + \frac{1}{\rho} \partial_\rho + \frac{1}{\rho^2} \partial_\theta^2 \right) A(\rho, \theta) = \sigma A(\rho, \theta) \quad (7.5.85)$$

⁵Waarbij we met licht misbruik van notatie $A(\vec{x}(\rho, \theta)) = A(\rho, \theta)$ noteren.

$$\Rightarrow (F''(\rho) + \frac{F'(\rho)}{\rho})G(\theta) + \frac{F(\rho)}{\rho^2}G''(\theta) = \sigma F(\rho)G(\theta) \quad (7.5.86)$$

$$\Rightarrow F''(\rho) + \frac{F'(\rho)}{\rho} + \frac{F(\rho)}{\rho^2} \frac{G''(\theta)}{G(\theta)} = \sigma F(\rho) \quad (7.5.87)$$

Aangezien deze vergelijking voor elke θ en ρ moet gelden, vinden we onmiddellijk dat G''/G constant moet zijn, of:

$$G''(\theta) = -m^2 G(\theta), \quad (7.5.88)$$

met als enige mogelijke oplossingen consistent met de periodiciteit van de hoek $\theta \rightarrow \theta + 2\pi$:

$$G(\theta) = \cos(m\theta + \alpha) \quad m \in \mathbb{N} \quad (7.5.89)$$

met α een arbitraire fase. De vergelijking voor $F(\rho)$ wordt dan:

$$F''(\rho) + \frac{F'(\rho)}{\rho} - m^2 \frac{F(\rho)}{\rho^2} = \sigma F(\rho), \quad (7.5.90)$$

of na vermenigvuldiging met ρ :

$$\rho F''(\rho) + F'(\rho) - m^2 \frac{F(\rho)}{\rho} = \sigma \rho F(\rho). \quad (7.5.91)$$

Dit is de zogenaamde *Besselvergelijking*, en men kan aantonen dat deze vergelijking enkel oplossingen heeft die niet-singulier zijn in $\rho = 0$ en bovendien verdwijnen voor bepaalde waarden van ρ (wat we nodig hebben om te kunnen voldoen aan (7.5.83)), voor negatieve waarden van de scheidingsconstante $\sigma < 0$. Schrijven we $\lambda = -\sigma > 0$ dan lezen deze niet-singuliere oplossingen:

$$F(\rho) = J_m(\rho\sqrt{\lambda}), \quad (7.5.92)$$

waarbij $J_m(x)$ bekend staat als de cilindrische Besselfunctie van orde m . De randvoorwaarde (7.5.83) impliceert dan dat deze Besselfunctie moet verdwijnen op de rand $\rho = R$: $F(R) = 0$, of dus:

$$J_m(R\sqrt{\lambda}) = 0. \quad (7.5.93)$$

Dit zal uiteindelijk zorgen voor een discreet spectrum van de eigenwaarden λ . Om deze te bepalen kijken we naar de nulpunten van de Besselfuncties. Voor een gegeven m heeft $J_m(x)$ oneindig veel nulpunten $x_{m,n} > 0$ met $n = 1, 2, \dots$, gelabeld van klein naar groot. Aldus krijgen de eigenwaarden een dubbel label $\lambda_{m,n}$ met $R\lambda_{m,n}^{1/2} = x_{m,n}$. Samengevat krijgen we voor de cirkelvormige drum de normale modes (zie ook figuur 7.3):

$$A_{m,n}(\rho, \theta) = \cos(m\theta + \alpha)J_m\left(\frac{\rho}{R}x_{m,n}\right), \quad (7.5.94)$$

horende bij $\sigma = -\lambda_{m,n} = -x_{m,n}^2/R^2$. De tijdsafhankelijkheid van de volledige normale modes,

$$u_{m,n}(\rho, \theta) = A_{m,n}(\rho, \theta)T_{m,n}(t) \quad (7.5.95)$$

vinden we tot slot makkelijk uit (7.5.82):

$$T''_{m,n}(t) = -\left(\frac{cx_{m,n}}{R}\right)^2 T(t) \quad \Rightarrow \quad T_{m,n}(t) = s_{m,n} \cos\left(\frac{cx_{m,n}}{R}t\right) + t_{m,n} \sin\left(\frac{cx_{m,n}}{R}t\right). \quad (7.5.96)$$

De normale modes hebben dus eigenfrequenties

$$f_{m,n} = \frac{c\lambda_{m,n}^{1/2}}{2\pi} = \frac{cx_{m,n}}{2\pi R}. \quad (7.5.97)$$

In tegenstelling tot het 1D geval komen deze eigenfrequenties niet langer voor volgens gehele verhoudingen, vandaar dat een drum geen zuivere tonen voortbrengt⁶. Voor de vier laagste waarden van de nulpunten, en dus laagste frequenties, hebben we (afgerond):

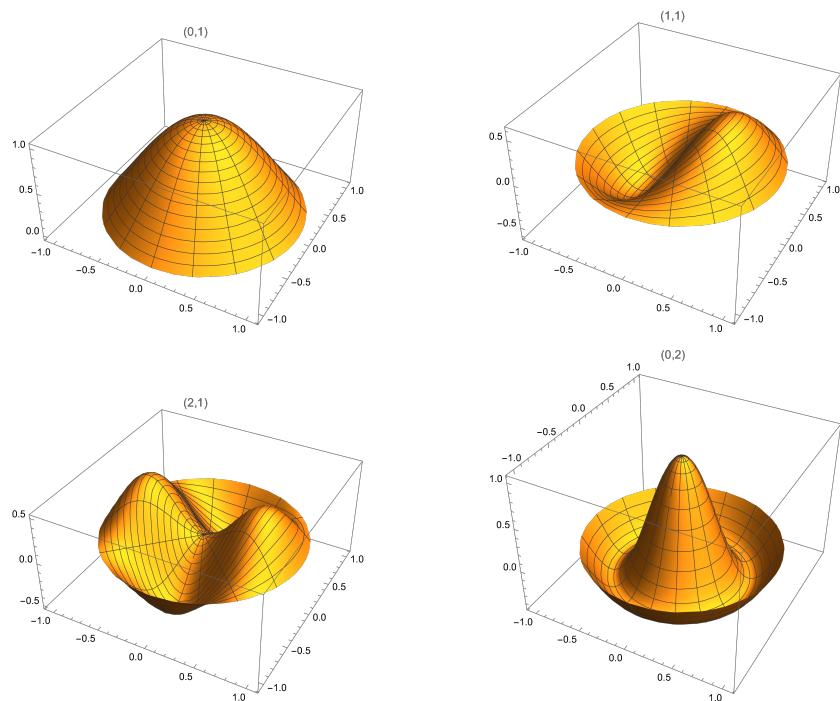
$$x_{0,1} = 2.40 \quad x_{1,1} = 3.83 \quad x_{2,1} = 5.14 \quad x_{0,2} = 5.52. \quad (7.5.98)$$

Volledig analoog als in het 1D geval vinden we een algemene oplossing dan als een superpositie van normale modes:

$$u(\vec{x}, t) = \sum_{m,n} \left(s_{m,n} \cos\left(\frac{cx_{m,n}}{R}t\right) + t_{m,n} \sin\left(\frac{cx_{m,n}}{R}t\right) \right) A_{m,n}(\rho, \theta), \quad (7.5.99)$$

waarbij de vrije coëfficiënten $s_{m,n}, c_{m,n}$ volgen uit de beginvoorwaarden $f(\vec{x}) = u(\vec{x}, 0)$ en $g(\vec{x}) = \partial_t u(\vec{x}, t)|_{t=0}$. We werken dit hier niet verder uit. Zie ook het bord/werkcollege voor het makkelijkere 2D geval van een vierkante plaat.

⁶Een klassiek probleem in de wiskunde is 'Can one hear the shape of a drum?' Kunnen we met andere woorden de vorm van de rand volledig afleiden uit het frequentiespectrum. Het antwoord blijkt 'niet helemaal' te zijn (zie wikipedia).



Figuur 7.3: Voor de 2D drum, de vier normale modes (7.5.94) met laagste frequenties, $(m, s) = (0, 1), (1, 1), (2, 1), (0, 2)$, voor $R = 1$, $\alpha = 0$.

Hoofdstuk 8

Integraaltransformaties

In dit laatste hoofdstuk behandelen we integraaltransformaties. Deze zijn algemeen van de vorm:

$$\mathcal{T}[f(t)](\alpha) = \int_b^a dt f(t) K(\alpha, t). \quad (8.0.1)$$

Een integraaltransformatie wordt dus bepaald door een kern (in het Engels: *kernel*) $K(\alpha, t)$ die via de integraal, een algemene functie $f(t)$ van de variabele t , omzet in een getransformeerde functie: $\hat{f}(\alpha) = \mathcal{T}[f(t)](\alpha)$ van de variabele α .

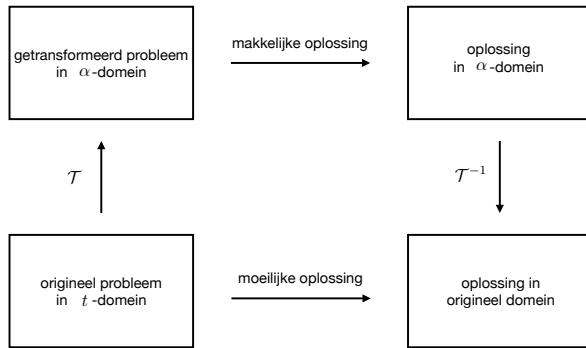
Dergelijke transformaties komen bvb. voor bij de verwerking van signalen, waar het dan nuttig blijkt van het getransformeerde signaal te analyseren en/of bewerken (in het α -domein) in plaats van het originele signaal (in het t -domein). Integraaltransformaties blijken ook nuttig bij het oplossen van differentiaalvergelijkingen of integro-differentiaalvergelijkingen. Algemeen bestaat de filosofie er in van het originele moeilijk op te lossen probleem, via \mathcal{T} te transformeren naar een makkelijker op te lossen probleem in het α -domein. Waarna de oplossing dan kan terug getransformeerd worden, via de inverse transformatie \mathcal{T}^{-1} , naar het originele domein (zie figuur 8.1).

Laat ons hier alvast een belangrijke algemene eigenschap van integraaltransformaties opmerken: ze zijn **lineair**. Inderdaad, uit de definitie (8.0.1) vinden we onmiddellijk (voor $a, b \in \mathbb{C}$):

$$\mathcal{T}[af + bg] = a\mathcal{T}[f] + b\mathcal{T}[g]. \quad (8.0.2)$$

Wij concentreren ons in dit hoofdstuk specifiek op twee integraaltransformaties:

$$\begin{aligned} \text{Fourier:} \quad & K(\omega, t) = e^{-i\omega t} \quad]a, b[=] - \infty, +\infty[\quad \omega \in \mathbb{R} \\ \text{Laplace:} \quad & K(z, t) = e^{-zt} \quad [a, b[= [0, +\infty[\quad z \in \mathbb{C} \end{aligned} \quad (8.0.3)$$



Figuur 8.1: Algemene filosofie bij het gebruik van integraaltransformaties.

8.1 Fouriertransformatie

8.1.1 Definities en eigenschappen

De **Fouriertransformatie** voor een (reële of complexe) functie $f(t)$ van een reële variabele t wordt gedefinieerd als¹:

$$\hat{f}(\omega) = \mathcal{F}[f(t)](\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) e^{-i\omega t} \quad \omega \in \mathbb{R}, \quad (8.1.4)$$

hierbij definiëren we $\int_{-\infty}^{+\infty} dt (\dots)$ als de symmetrische limiet van de eigenlijke integraal: $\lim_{T \rightarrow \infty} \int_{-T}^{+T} dt (\dots)$. Voor functies die stuksgewijs continu zijn en die bovendien **absoluut integreerbaar** zijn:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt |f(t)| < +\infty, \quad (8.1.5)$$

is deze Fouriertransformatie goed gedefinieerd en zal $\lim_{\omega \rightarrow \pm\infty} f(\omega) = 0$. Voor functies die bovendien stuksgewijs continu afleidbaar zijn, is ook de inverse transformatie goed gedefinieerd. Deze **inverse Fouriertransformatie** heeft nagenoeg dezelfde vorm als de originele transformatie:

$$f(t) = \mathcal{F}^{-1}[\hat{f}(\omega)](t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \hat{f}(\omega) e^{+i\omega t} \quad t \in \mathbb{R}, \quad (8.1.6)$$

waarbij we opmerken dat voor discontinue punten $\mathcal{F}^{-1}[\hat{f}(\omega)](t) = \frac{1}{2}(f(t_+) + f(t_-))$.

We zien dus dat de Fouriertransformatie ons toelaat van een signaal $f(t)$ in het **tijdsdomein** $t \in [-\infty, +\infty]$ te schrijven als een superpositie van frequentiecomponenten $\propto e^{i\omega t}$. Het getransformeerde signaal $\hat{f}(\omega)$ geeft ons dan het signaal in het

¹Maple hanteert dezelfde conventie, $\text{fourier}(f(t), t, \omega) = \mathcal{F}[f(t)](\omega)$, zoals hier gedefinieerd.

frequentiedomein ${}^2\omega \in]-\infty, +\infty[$. De overeenkomsten met de Fourierreeks en de DFT (hoofdstuk 6) zijn navenant, het verschil tussen de drie transformaties zit hem in de aard van zowel het tijdsdomein als frequentiedomein. Bij de DFT zijn beide domeinen discreet en eindig, terwijl de Fourierreeks een eindig continu tijdsdomein $[-T/2, T/2]$ heeft en een oneindig discreet frequentiedomein.

Verband met Fourierreeks

Net als we de Fourierreeks kunnen construeren als limiet van de discrete Fourier transformatie (zie § 6.2), kunnen we ook de Fouriertransformatie opvatten als een limiet van Fourierreeks, waarbij we de lengte van het beschouwde interval $[-T/2, T/2]$ naar oneindig laten gaan, $T \rightarrow \infty$. We starten hiervoor van de uitdrukking (6.1.15) voor de Fourierreeks:

$$\begin{aligned} f(t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{i \frac{2\pi n}{T} t} \\ &= \frac{1}{T} \sum_{n=-\infty}^{\infty} T c_n e^{i \frac{2\pi n}{T} t} \\ &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{\Delta\omega}{2\pi} \hat{f}(\omega_n) e^{i\omega_n t} \\ &\approx \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \hat{f}(\omega) e^{i\omega t}. \end{aligned} \quad (8.1.7)$$

Op de derde lijn identificeren we $\omega_n = \frac{2\pi n}{T}$, $T c_n = \hat{f}(\omega_n)$ en $\Delta\omega = \frac{2\pi}{T}$. De laatste lijn geldt in de limiet $T \rightarrow \infty$, waarbij de sommatie een integratie over de continue variabele ω wordt. Het is in deze limiet dat we de uitdrukking voor de inverse Fouriertransformatie (8.1.6) terugvinden.

Omgekeerd kunnen we dan de uitdrukking voor de Fouriercoëfficiënten (6.1.16) op de volgende manier herschrijven:

$$\begin{aligned} T c_n = \hat{f}(\omega_n) &= \int_0^T dt f(t) e^{-i \frac{2\pi n}{T} t} \\ &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt f(t) e^{-i \frac{2\pi n}{T} t} \\ &= \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} dt f(t) e^{-i\omega_n t}, \end{aligned} \quad (8.1.8)$$

wat we in de limiet $T \rightarrow \infty$ herkennen als de uitdrukking (8.1.4) voor de Fouriertransformatie. Hier gebruikten we op de tweede lijn de veronderstelde periodiciteit van $f(t)$, $f(t) = f(t - T)$.

²Meer algemeen spreken we ook van het Fourierdomein. Hier interpreteren we t als een tijdsvariabele, zodat $\omega = 2\pi f$ inderdaad overeenkomt met een frequentie. Zoals we verderop in dit hoofdstuk zien, zijn er even goed toepassingen waarbij het originele domein een ruimte- (i.p.v. tijds-) karakter heeft (zie verderop in dit hoofdstuk).

Fourierrepresentatie van de Dirac-delta functie

De Fouriertransformatie kan ook gebruikt worden voor **distributies**, zoals de Dirac-delta functie $\delta(t - t_0)$. Deze wordt gedefinieerd door:

$$f(t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \delta(t - t_0) f(t), \quad (8.1.9)$$

voor elke functie $f(t)$ die continu is in een omgeving van t_0 . Ruwweg gezegd kunnen we de Dirac-delta functie dus opvatten als een oneindig scherp rond t_0 gepikte puls.

We halen de Fourierrepresentatie van deze Dirac-delta functie uit de combinatie van de inverse transformatie \mathcal{F}^{-1} en de originele transformatie \mathcal{F} :

$$\begin{aligned} f(t_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \hat{f}(\omega) e^{i\omega t_0} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) e^{i\omega(t_0-t)} \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) \left(\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(t_0-t)} \right). \end{aligned} \quad (8.1.10)$$

De verwisseling van de integratievolgorde van twee oneigenlijke integralen blijkt gerechtvaardigd voor de absoluut integreerbare functies die we hier beschouwen. Uit de laatste lijn kunnen we dan een uitdrukking aflezen voor de Dirac-delta functie:

$$\delta(t - t_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(t_0-t)} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{i\omega(t-t_0)}, \quad (8.1.11)$$

waarbij we voor de laatste gelijkheid een verandering van integratievariabele, $\omega \rightarrow -\omega$, gebruiken. Door deze uitdrukking te identificeren met (8.1.6) kunnen we dit ook nog schrijven als

$$\mathcal{F}[\delta(t - t_0)](\omega) = e^{-i\omega t_0} \quad (8.1.12)$$

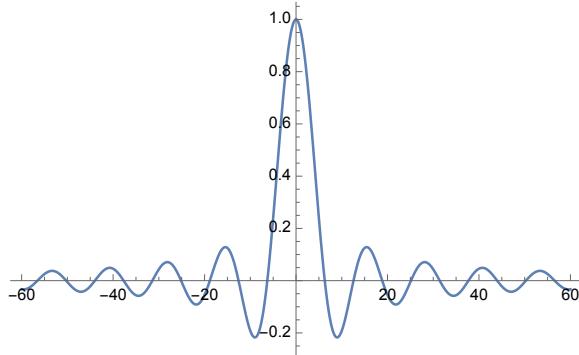
De moeilijk te hanteren Dirac-delta functie in het tijdsdomein, wordt een eenvoudige functie in het frequentie-domein.

Voorbeeld: de Fouriertransformatie van een discrete puls. Dit is een illustratief voorbeeld dat goed het verband tussen de signaalkarakteristieken in het tijdsdomein en het frequentiedomein illustreert. Voor de Fouriertransformatie van een discrete puls:

$$h(t) = \begin{cases} 0 & t \notin [-\frac{\Delta t}{2}, \frac{\Delta t}{2}] \\ h & -\frac{\Delta t}{2} < t < \frac{\Delta t}{2} \end{cases} \quad (8.1.13)$$

vinden we:

$$\begin{aligned}
 \hat{h}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} h(t)e^{-i\omega t} dt \\
 &= h \int_{-\frac{\Delta t}{2}}^{+\frac{\Delta t}{2}} e^{-i\omega t} dt \\
 &= h \frac{\sin(\omega \frac{\Delta t}{2})}{\frac{\omega}{2}}
 \end{aligned} \tag{8.1.14}$$



Figuur 8.2: De functie (8.1.14) voor $h = \Delta t = 1$.

We zien dat deze functie gepiekt is rond $\omega = 0$, met $\hat{h}(0) = h\Delta t$. En dat de breedte $\Delta\omega$ gaat als $\frac{1}{\Delta t}$. Heel korte pulsen in het tijdsdomein, impliceert een brede functie in het frequentiedomein en omgekeerd:

$$\Delta\omega \times \Delta t \gtrsim 1 \tag{8.1.15}$$

Dit fenomeen is welbekend in de muziek, waar heel korte staccato's onvermijdelijk een spreiding $\Delta\omega \sim \frac{1}{\Delta t}$ voor de geluidsfrequenties betekenen. Het is ook een belangrijke wetmatigheid bij communicatie. Het maximum aantal bits dat per seconde kan worden verstuurd, f_B is begrensd door de bandbreedte $\Delta\omega$ van het communicatiekanaal: $f_B \sim 1/\Delta t \lesssim \Delta\omega$. Dezelfde wiskundige relatie speelt ook in de kwantumphysica waarbij een deeltje door een golffunctie wordt beschreven. Hierbij beschrijft de golffunctie in het 'tijdsdomein' dan de spreiding in de positie x en deze in het 'frequentiedomein' de spreiding in het momentum $p = \hbar\omega$ van het deeltje. Wat dan uiteindelijk $\Delta x \cdot \Delta p \gtrsim \hbar$ geeft, de beroemde onzekerheidsrelatie van Heisenberg.

Bemerkt ook dat voor $h = 1/\Delta t$, de pulsfunctie $h_{\Delta t}(t)$, in de limiet $\Delta t \rightarrow 0$ een representatie van de Dirac-delta functie geeft: $\delta(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} h_{\Delta t}(t)$. In deze limiet vinden we voor de Fouriergetransformeerde $\hat{h}(\omega) = 1$ voor $\omega \in]-\infty, +\infty[$, wat consistent is met (8.1.12).

Eigenschappen van de Fouriertransformatie

Enkele belangrijke eigenschappen van de Fouriertransformatie zijn:

- **Translatie in de tijd:** $\mathcal{F}[f(t - a)](\omega) = e^{-i\omega a} \hat{f}(\omega)$ met $\omega \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}$;
- **Complexe toevoeging:** $\mathcal{F}[\overline{f(t)}](\omega) = \overline{\mathcal{F}[f](-\omega)}$, $\omega \in \mathbb{R}$;
- **Translatie in de frequentie:** $\mathcal{F}[e^{iat} f(t)](\omega) = \hat{f}(\omega - a)$, $\omega \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}$;
- **Modulatie:** $\mathcal{F}[f(t) \cos(at)](\omega) = \frac{1}{2} (\hat{f}(\omega - a) + \hat{f}(\omega + a))$, $\omega \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R}$;
- **Schaalwijziging:** $\mathcal{F}[f(at)](\omega) = \frac{1}{|a|} \hat{f}\left(\frac{\omega}{a}\right)$, $\omega \in \mathbb{R}$, $a \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$;
- **Tijdsreversie:** $\mathcal{F}[f(-t)](\omega) = \hat{f}(-\omega)$, $\omega \in \mathbb{R}$.
- **Afleiding in frequentie-domein:** $\frac{d}{d\omega} \mathcal{F}[f(t)](\omega) = -i \mathcal{F}[tf(t)](\omega)$

We geven het bewijs van de eerste eigenschap bij wijze van voorbeeld (bewijs de overige eigenschappen zelf als **oefening**). Er geldt dat

$$\mathcal{F}[f(t - a)](\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t - a) e^{-i\omega t} = \int_{-\infty}^{+\infty} ds f(s) e^{-i\omega(s+a)}, \quad (8.1.16)$$

waarbij we de substitutie $s = t - a$ doorgevoerd hebben. Deze laatste uitdrukking kunnen we herschrijven als:

$$e^{-i\omega a} \int_{-\infty}^{+\infty} ds f(s) e^{-i\omega s} = e^{-i\omega a} \hat{f}(\omega), \quad (8.1.17)$$

waaruit het gestelde volgt.

8.1.2 Convolutietheorema

Beschouw een signaal $f(t)$ dat wordt *geconvoluteerd* met een *transferfunctie* $g(t)$:

$$F(t) = (f * g)(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau g(t - \tau) f(\tau) \quad (8.1.18)$$

Voor de Fouriertransformatie van $F(t)$ krijgen we dan eenvoudigweg het product van de Fouriertransformaties van $f(t)$ en $g(t)$:

$$\mathcal{F}[(f * g)(t)](\omega) = \hat{F}(\omega) = \hat{f}(\omega) \hat{g}(\omega). \quad (8.1.19)$$

Bewijs. Voor $\hat{F}(\omega)$ hebben we:

$$\begin{aligned}
 \hat{F}(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau g(t-\tau) f(\tau) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau f(\tau) \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-i\omega t} g(t-\tau) \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau f(\tau) e^{-i\omega \tau} \int_{-\infty}^{+\infty} dt' e^{-i\omega t'} g(t') \\
 &= \hat{f}(\omega) \hat{g}(\omega),
 \end{aligned} \tag{8.1.20}$$

(op de derde lijn gaan we hier over op de nieuwe integratievariabele $t' = t - \tau$).

Toepassing: running mean. Dikwijs kan het interessant zijn om uit een functie $f(t)$ een 'lopend gemiddelde' (=running mean) te halen. Neem bijvoorbeeld de stap van weerdata naar klimaatdata, waarbij we geïnteresseerd zijn in de evolutie van de gemiddelde temperatuur, eerder dan de ogenblikkelijke temperatuur. Concreet willen we dan het signaal $f(t)$ vertalen naar een ogenblikkelijk gemiddelde via :

$$F_T(t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} dt' f(t') \tag{8.1.21}$$

Dit is een convolutie met de pulsfunctie (8.1.13) (met $h = \frac{1}{T}$ en $\Delta t = T$):

$$F_T(t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\tau h(t-\tau) f(\tau). \tag{8.1.22}$$

In het frequentiedomein wordt dit dan:

$$\hat{F}_T(\omega) = \hat{f}(\omega) \frac{\sin(\frac{\omega T}{2})}{\frac{\omega T}{2}}. \tag{8.1.23}$$

8.1.3 Fouriertransformatie van afgeleiden

Een belangrijke eigenschap is dat de Fouriertransformatie van de afgeleide van een functie $f(t)$ op een heel eenvoudige manier gerelateerd is aan de Fouriertransformatie van de functie zelf:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{F}[f'(t)](\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt f'(t) e^{-i\omega t} \\
 &= f(t) e^{-i\omega t} \Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) \frac{d}{dt} e^{-i\omega t} \\
 &= i\omega \mathcal{F}[f(t)](\omega),
 \end{aligned} \tag{8.1.24}$$

waarbij we op de tweede lijn een partiële integratie toepasten en op de derde lijn gebruik maken van $\lim_{t \rightarrow \pm\infty} f(t) = 0$ wat volgt uit de absolute integreerbaarheid. Een afgeleide

in het tijdsdomein vertaalt zich dus naar de vermenigvuldiging met een factor $i\omega$ in het frequentiedomein. Dit veralgemeend naar n -de orde afgeleiden:

$$\mathcal{F}[f^{(n)}(t)](\omega) = (i\omega)^n \mathcal{F}[f(t)](\omega) \quad (8.1.25)$$

Hierdoor vertalen differentiaalvergelijkingen in het originele domein zich naar dikwijls makkelijker op te lossen algebraische vergelijkingen in het Fourierdomein.

Toepassing: Fouriertransformatie van golfvergelijking.

Beschouw de 1D golfvergelijking op de volledige reële as,

$$\partial_t^2 \phi(x, t) - c^2 \partial_x^2 \phi(x, t) = 0, \quad x \in]-\infty, \infty[, \quad t \in [0, +\infty[\quad (8.1.26)$$

met beginvoorwaarden:

$$\phi(x, 0) = f(x) \quad \partial_t \phi(x, t)|_{t=0} = g(x) \quad (8.1.27)$$

We lossen dit op door gebruik te maken van een Fourierrepresentatie voor de x -variabele (niet de t -variabele!):

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{\phi}(k, t) e^{ikx} \quad (8.1.28)$$

Hiervoor brengen we de vergelijkingen (8.1.26) en (8.1.30) naar het Fourierdomein (k -domein), door toepassing van de Fouriertransformatie op elke term in de vergelijking:

$$\partial_t^2 \hat{\phi}(k, t) + k^2 c^2 \hat{\phi}(k, t) = 0 \quad k \in]-\infty, \infty[, \quad t \in [0, +\infty[\quad (8.1.29)$$

$$\hat{\phi}(k, 0) = \hat{f}(k) \quad \partial_t \hat{\phi}(k, t)|_{t=0} = \hat{g}(k), \quad (8.1.30)$$

waarbij we gebruik maken van het feit dat de afgeleiden naar t commuteren met de x -integratie, $\int dx \partial_t^n(\dots) = \partial_t^n (\int dx (\dots))$, en van (8.1.25) ($\partial_x \rightarrow ik$). Voor een vaste k is (8.1.29) de harmonische vergelijking met eigenfrequentie $\omega_0 = c|k|$. Zo vinden we onmiddellijk als algemene oplossing:

$$\hat{\phi}(k, t) = \hat{\phi}_1(k) \cos ckt + \hat{\phi}_2(k) \sin ckt. \quad (8.1.31)$$

Leggen we ook nog de beginvoorwaarden op, dan krijgen we:

$$\hat{\phi}_1(k) = \hat{f}(k) \quad \text{en} \quad \hat{\phi}_2(k) = \frac{1}{ck} \hat{g}(k). \quad (8.1.32)$$

Tot slot brengen we ϕ terug naar het x -domein, en vinden we de oplossing:

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk (\hat{\phi}_1(k) \cos ckt + \hat{\phi}_2(k) \sin ckt) e^{ikx}, \quad (8.1.33)$$

met $\hat{\phi}_1(k)$ en $\hat{\phi}_2(k)$ gegeven door (8.1.32). Dezelfde strategie kan ook toegepast worden op (partiële) differentiaalvergelijkingen van een andere vorm, zie hiervoor de oefeningenlijst bij dit hoofdstuk.

Slotbemerk: specifiek voor de 1D golfvergelijking is dat de algemene oplossing kan geschreven worden als de som van een rechtslopende en een linkslopende golf, met snelheid $\pm c$:

$$\phi(x, t) = \phi_+(x - ct) + \phi_-(x + ct). \quad (8.1.34)$$

Dit zien we explicet door (8.1.33) te herschrijven:

$$\phi(x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{\phi}_+(k) e^{ik(x-ct)} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \hat{\phi}_-(k) e^{ik(x+ct)}, \quad (8.1.35)$$

met $\hat{\phi}_{\pm}(k) = \frac{\hat{\phi}_1(k) \pm i\hat{\phi}_2(k)}{2}$.

8.2 Laplacetransformatie

8.2.1 Definitie en eigenschappen

Een beperking van de Fouriertransformatie is de voorwaarde van absolute integreerbaarheid, die bijvoorbeeld polynomiaal stijgende functies $f(t) \stackrel{\lim t \rightarrow \infty}{\sim} t^\alpha$ met $\alpha \geq -1$, of exponentieel stijgende functies $f(t) \stackrel{\lim t \rightarrow \infty}{\sim} e^{\alpha t}$ met $\alpha > 0$ uitsluit. Ook de Fouriertransformatie van de circulaire functies $\sin \omega t, \cos \omega t$ is singulier. De Laplace transformatie is een uitbreiding van de Fouriertransformatie die deze beperkingen overstijgt. Deze integraaltransformatie wordt gedefinieerd als:

$$\boxed{\mathcal{L}[f(t)](z) = \int_0^{+\infty} dt f(t) e^{-zt}}, \quad (8.2.36)$$

hier is z een complexe parameter. $\mathcal{L}[f](z)$ wordt het **Laplacebeeld** of de **Laplace-transformatie** genoemd van f . We bemerken twee belangrijke verschillen met de Fouriertransformatie:

1. Anders dan bij de Fouriertransformatie wordt er nu over het interval $[0, +\infty[$ geïntegreerd. Twee functies $f_1(t)$ en $f_2(t)$ die samenvallen op de positieve reële as, $f_1(t) = f_2(t)$ voor $t \geq 0$, hebben dus hetzelfde Laplacebeeld. We kunnen de Laplacetransformatie ook formeel herschrijven als een integraal over de volledige reële as:

$$\mathcal{L}[f(t)](z) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt f(t) \theta(t) e^{-zt}, \quad (8.2.37)$$

met $\theta(t)$ de Heaviside functie:

$$\theta(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \geq 0 \end{cases} \quad (8.2.38)$$

De functie $\tilde{f}(t) = f(t)\theta(t)$ verdwijnt voor $t < 0$. Dergelijke functies worden ook nog *causale functies* genoemd.

2. Schrijven we $z = x + iy$ dan hebben we $|e^{-zt}| = e^{-xt}$. Het is dankzij deze exponentiële factor dat het convergentiegedrag van de Laplaceintegraal voor $t \rightarrow +\infty$ beter is dan voor de Fourierintegraal. In het bijzonder hebben we dat, voor functies $f(t)$ die voor $t \geq 0$ voldoen aan $|f(t)| < M e^{s_0 t}$ voor reële constanten M en s_0 , de Laplaceintegraal zal convergeren indien $\operatorname{Re}(z) > s_0$, in het deel dus van het complexe vlak dat rechts ligt van de verticale rechte $x = s_0$.

Voorbeelden.

- Het Laplacebeeld van $f(t) = 1$.

$$\int_0^{+\infty} dt e^{-zt} = \lim_{L \rightarrow \infty} \int_0^L dt e^{-zt} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1 - e^{-zL}}{z} \quad (8.2.39)$$

Schrijven we $e^{-zL} = e^{-(x+iy)L} = e^{-xL}e^{-iyL}$, dan is het duidelijk dat de integraal convergeert, $\lim_{L \rightarrow \infty} e^{-zL} = 0$, voor $x > 0$, i.e. $\operatorname{Re}(z) > 0$. Voor $\operatorname{Re}(z) \leq 0$ convergeert de Laplacetransformatie niet. We vinden dus:

$$\mathcal{L}[1](z) = \frac{1}{z} \quad \operatorname{Re}(z) > 0 \quad (8.2.40)$$

- Het Laplacebeeld van $f(t) = e^{at}$ met a een complexe constante.

$$\int_0^{+\infty} dt e^{at} e^{-zt} = \int_0^{+\infty} dt e^{-(z-a)t} = \lim_{L \rightarrow +\infty} dt \int_0^L e^{-(z-a)t} = \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{1 - e^{-(z-a)L}}{z - a}. \quad (8.2.41)$$

Analoog aan het voorgaande voorbeeld bekomen we dat

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} e^{-(z-a)L} = 0 \quad \text{als } \operatorname{Re}(z - a) > 0, \quad (8.2.42)$$

terwijl in alle andere gevallen deze limiet niet bestaat. We vinden dus

$$\mathcal{L}[e^{at}](z) = \frac{1}{z - a} \quad \operatorname{Re}(z - a) > 0. \quad (8.2.43)$$

- Het Laplacebeeld van $\cos(at)$ met a een reële constante. Uit $\cos(at) = \frac{1}{2}(e^{iat} + e^{-iat})$ vinden we uit het vorige voorbeeld, door toepassing van de lineariteit (8.0.2):

$$\mathcal{L}[\cos(at)](z) = \frac{1}{2}(\mathcal{L}[e^{iat}] + \mathcal{L}[e^{-iat}]) = \frac{1}{2(z - ia)} + \frac{1}{2(z + ia)} = \frac{z}{z^2 + a^2} \quad \operatorname{Re}(z) > 0 \quad (8.2.44)$$

In deze voorbeelden zien we explicet, in overeenstemming met de bemerking 2 hierboven, dat voor een Laplacetransformeerbare functie $f(t)$ het Laplacebeeld $F(z)$

bestaat in een rechterdeel van complex vlak, $\operatorname{Re}(z) > \gamma_f$. Men spreekt hier over de *convergentieabscis* γ_f . Typisch kunnen we γ_f ook rechtstreeks aflezen uit het Laplacebeeld als de reële waarde van het meest rechtse singuliere punt van $F(z)$. Men kan zich ook afvragen of alle functies $f(t)$ Laplacetransformeerbaar zijn, i.e. een Laplacebeeld hebben in een deel van het complexe vlak? Het antwoord is neen, zo zal de Laplace-integraal $\mathcal{L}[f](z)$ van $f(t) = e^{t^2}$ of $f(t) = t^\alpha$ met $\alpha \leq -1$ voor geen enkele waarde van z convergeren; in het eerste geval doordat de Laplaceintegraal divergeert op oneindig, in het tweede geval doordat er een divergentie optreedt rond nul.

In tabel 8.2.1 geven we een overzicht van gangbare Laplacetransformaties:

$f(t)$	$\mathcal{L}[f(t)](z)$
1	$\frac{1}{z}$
$\exp(at)$	$\frac{1}{z-a}$
$t^n, n = 1, 2, 3, \dots$	$\frac{n!}{z^{n+1}}$
\sqrt{t}	$\frac{\sqrt{\pi}}{2z^{\frac{3}{2}}}$
$\sin(at)$	$\frac{a}{z^2 + a^2}$
$\cos(at)$	$\frac{z}{z^2 + a^2}$
$t \sin(ta)$	$\frac{2az}{(z^2 + a^2)^2}$
$t \cos(ta)$	$\frac{z^2 - a^2}{(z^2 + a^2)^2}$
$\sin(at + b)$	$\frac{z \sin(b) + a \cos(b)}{z^2 + a^2}$
$\cos(at + b)$	$\frac{z \cos(b) - a \sin(b)}{z^2 + a^2}$
$\sinh(at)$	$\frac{a}{z^2 - a^2}$
$\cosh(at)$	$\frac{z}{z^2 - a^2}$

Tabel 8.1: Bekende Laplacetransformaties

Enkele eigenschappen van de Laplacetransformatie (toon deze als **oefening** zelf aan). Als de functies f en g laplacebeelden $F(z)$ en $G(z)$ bezitten voor respectievelijk $\operatorname{Re}(z) > \gamma_f$ en $\operatorname{Re}(z) > \gamma_g$, dan geldt:

- **Translatie:** $\mathcal{L}[f(t-a)\theta(t-a)](z) = \exp(-az)F(z)$, $\operatorname{Re}(z) > \gamma_f$, $a > 0$;
- **Lineariteit:** $\mathcal{L}[\alpha f + \beta g](z) = \alpha F(z) + \beta G(z)$, in $\operatorname{Re}(z) > \max(\gamma_f, \gamma_g)$;
- **Demping:** $\mathcal{L}[f(t) \exp(-at)](z) = F(z+a)$, $\operatorname{Re}(z+a) > \gamma_f$;
- **Schaalwijziging:** $\mathcal{L}[f(at)](z) = \frac{1}{a}F\left(\frac{z}{a}\right)$, $\operatorname{Re}\left(\frac{z}{a}\right) > \gamma_f$, $a > 0$;
- **Afleiding in frequentie-domein:** $\frac{d}{dz}\mathcal{L}[f(t)](z) = \mathcal{L}[-tf(t)](z)$, $\operatorname{Re}(z) > \gamma_f$,

8.2.2 De inverse Laplacetransformatie

De Laplacetransformatie kan enkel nuttig zijn als we Laplacegetransformeerde functies $F(z)$ via de inverse transformatie kunnen terugbrengen naar het originele domein:

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}[F(z)](t). \quad (8.2.45)$$

Wat betreft het gedefinieerd zijn van deze inverse operatie hebben we vooreerst de belangrijke stelling van Lerch: Als $\mathcal{L}[f_1(t)](z) = \mathcal{L}[f_2(t)](z)$ dan is voor $t > 0$, $f_1(t) = f_2(t) + N(t)$ met

$$\int_0^{t_0} N(t) dt = 0 \quad \forall t_0 > 0 \quad (8.2.46)$$

of $N(t) \neq 0$ in een aftelbaar aantal punten. Bij ingenieurstoepassingen, waar we met (stuksgewijs) **continue functies** werken, kunnen we $N(t) = 0$ nemen, en **is de inverse Laplace transformatie dus uniek bepaald**.

Deze inverse transformatie wordt algemeen gegeven door de Bromwich integraal, die een integratie vergt in het complexe vlak, wat buiten het bestek van deze cursus valt. De inverse transformatie voor een bepaalde $F(z)$ kan in vele gevallen ook gevonden worden door het Laplacebeeld $F(z)$ via bovenstaande eigenschappen van de Laplacetransformatie te herschrijven als een lineaire combinatie van gekende Laplacebeelden uit bovenstaande tabel. Zie de voorbeelden hieronder. Ook Maple zal in vele gevallen een analytisch antwoord geven, zie de commandos 'laplace' (Laplacetransformatie) en vooral 'invlaplace' (inverse Laplacetransformatie).

Voorbeelden

- We starten met het Laplacebeeld $L(z) = \frac{z}{z^2+2z+2}$ in $\operatorname{Re}(z) > -1$. Schrijven we dit beeld als

$$L(z) = \frac{z}{1 + (z+1)^2}, \quad \operatorname{Re}(z) > -1 \quad (8.2.47)$$

dan denken we aan een combinatie van cosinus, sinus en de dempingseigenschap, aangezien

$$L(z) = \frac{z+1}{1+(z+1)^2} - \frac{1}{1+(z+1)^2} = \mathcal{L}[\cos(t)\exp(-t)](z) - \mathcal{L}[\sin(t)\exp(-t)](z), \quad (8.2.48)$$

zodat een Laplace-origineel gegeven wordt door $f(t) = \exp(-t)(\cos(t) - \sin(t))$ dat continu is in $[0, +\infty[$

- Gegeven het Laplacebeeld $L(z) = \frac{1}{z(z+1)}$ in $\operatorname{Re}(z) > 0$. Dit kunnen we herschrijven als

$$L(z) = \frac{1}{z} - \frac{1}{z+1}, \quad \operatorname{Re}(z) > 0. \quad (8.2.49)$$

Hierin herkennen we

$$L(z) = \mathcal{L}[1](z) - \mathcal{L}[\exp(-t)](z), \quad (8.2.50)$$

zodat een origineel gegeven wordt door $f(t) = (1 - \exp(-t))$ dat continu is in $[0, +\infty[$.

- Gegeven het Laplacebeeld $L(z) = \frac{z}{z^2-1}$ in $\operatorname{Re}(z) > 1$. We kunnen dit herschrijven als

$$L(z) = \frac{\frac{1}{2}}{z-1} + \frac{\frac{1}{2}}{z+1} \quad (8.2.51)$$

Hierin herkennen we

$$L(z) = \frac{1}{2}\mathcal{L}[\exp(t)](z) + \frac{1}{2}\mathcal{L}[\exp(-t)](z), \quad (8.2.52)$$

zodat $f(t) = \cosh(t)$ een Laplace-origineel is dat continu is in $[0, +\infty[$.

8.2.3 Laplacetransformatie van afgeleiden

Met het oog op het oplossen differentiaalvergelijkingen, is het net als voor de Fouriertransformatie interessant van de Laplacetransformatie van de afgeleide functie $f'(t)$ te bekijken. We hebben:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[f'(t)](z) &= \int_0^{+\infty} dt f'(t) e^{-zt} \\ &= f(t)e^{-zt}|_0^\infty + z \int_0^{+\infty} dt f(t) e^{-zt} \\ &= z\mathcal{L}[f(t)](z) - f(0) \quad (\text{voor } \operatorname{Re}(z) > \gamma_f), \end{aligned} \quad (8.2.53)$$

waar we op de tweede lijn partieel integratie gebruikten en op de derde lijn gebruikten dat $|f(t)| < M e^{\gamma_f t}$. We hebben dus voor een continue afleidbare functie $f(t)$ met Laplacebeeld $F(z)$:

$$\mathcal{L}[f'(t)](z) = zF(z) - f(0) \quad (8.2.54)$$

Via inductie vinden we dan (voor voldoende afleidbare functies):

$$\mathcal{L}[f^{(n)}(t)](z) = z^n F(z) - z^{n-1} f(0) - z^{n-2} f'(0) - \dots - f^{(n-1)}(0). \quad (8.2.55)$$

Een Laplacetransformatie zal een differentiaalvergelijking dus omzetten in een algebraïsche vergelijking, met inbegrip van de beginvoorwaarden.

Voorbeeld. Als voorbeeld beschouwen we de harmonische oscillator vergelijking met externe periodieke kracht (tweede geval van § 5.3), met algemene beginvoorwaarden:

$$\begin{cases} u'' + \omega_0^2 u = a \sin \omega t, \\ u(0) = u_0 \\ u'(0) = u_1 \end{cases} \quad (8.2.56)$$

De Laplacegetransformeerde vergelijking leest dan:

$$z^2 U(z) - zu_0 - u_1 + \omega_0^2 U(z) = \frac{a\omega}{z^2 + \omega^2} \quad (8.2.57)$$

Dit lossen we op naar $U(z)$:

$$U(z) = \frac{zu_0 + u_1}{z^2 + \omega_0^2} + \frac{a\omega}{(z^2 + \omega^2)(z^2 + \omega_0^2)}. \quad (8.2.58)$$

De oplossing $u(t)$ volgt dan uit de inverse Laplacetransformatie: $u(t) = \mathcal{L}^{-1}[U(z)](t)$. We bepalen deze hier handmatig. De inverse transformatie van de eerste term identificeren we makkelijk via de tabel (8.2.1):

$$U_1(z) = \frac{zu_0 + u_1}{z^2 + \omega_0^2} \quad \rightarrow \quad u_1(t) = u_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{u_1}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) \quad (8.2.59)$$

De tweede term heeft iets meer werk nodig:

$$U_2(z) = \frac{a\omega}{(z^2 + \omega^2)(z^2 + \omega_0^2)} = \frac{a\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \left(\frac{1}{z^2 + \omega^2} - \frac{1}{z^2 + \omega_0^2} \right) \quad (8.2.60)$$

waaruit we dan opnieuw via de tabel (8.2.1) halen:

$$u_2(t) = \frac{a\omega}{\omega_0^2 - \omega^2} \left(\frac{1}{\omega} \sin \omega t - \frac{1}{\omega_0} \sin \omega_0 t \right) \quad (8.2.61)$$

Nemen we alles samen dan vinden we uiteindelijk:

$$\begin{aligned} u(t) &= \mathcal{L}^{-1}[U_1(z) + U_2(z)](t) \\ &= u_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{u_1}{\omega_0} \sin(\omega_0 t) + \frac{a}{\omega_0^2 - \omega^2} \left(\sin \omega t - \frac{\omega}{\omega_0} \sin \omega_0 t \right). \end{aligned} \quad (8.2.62)$$