

# Moleculaire Modelling & Wiskunde

Paul Zegeling  
kamer 513, wiskundegebouw  
P.A.Zegeling@uu.nl, 030-2533720

## Introductiebijeenkomst

# Overzicht van het wiskundegedeelte (1)

## ★ hoorcollege/werkcollege:

- 12 sessies van 2 uur hoorcollege en 2 uur werkcollege
- Boek: Steiner, The Chemistry Maths Book, 2e editie
- Diktaat=handout (o.a. *extra opgaven*)
- <http://www.math.uu.nl/people/zegeling/molmodwisk.html>

## ★ werkcollege-assistenten:

Philip Klop, Hasan Kurt en Stephan Bongers

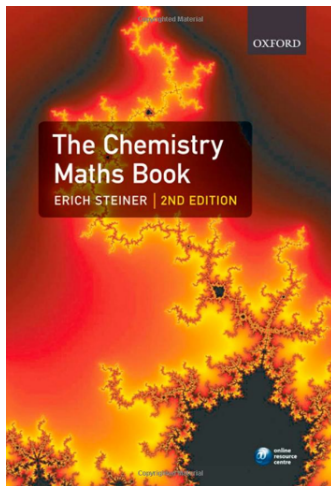
## ★ toetsing:

- 3x thuisopdracht ( $TH_1, TH_2, TH_3$ );  $\max(TH_{1,2,3})=3$
- tentamen (TT)

★ eindcijfer wiskunde:  $E = (1 + TH_1 + TH_2 + TH_3) / 6 + 5 * TT / 6$



# Overzicht van het wiskundegedeelte (2)



# Overzicht van het wiskundegedeelte (3)

## ★ Onderwerpen:

- partiele afgeleiden, kettingregel in meer variabelen
- grad:  $\nabla$ , div:  $\nabla \cdot$ , curl:  $\nabla \times$
- Taylorontwikkeling
- Newton-Raphson/minimalisatie van energie
- gewone differentiaalvergelijkingen (ook numeriek)
- partiële differentiaalvergelijkingen (ook numeriek)
- meervoudige integralen (ook numeriek)
- Fourierreksen en Fouriertransformatie

http://www.math.uu.nl/people/zegeling/molmodwisk.html

Paul Andries Zegeling - Mozilla Firefox

File Edit View History Bookmarks Tools Help


Paul Andries Zegeling

www.staff.science.uu.nl/~zegel101/

Google

## Paul Andries Zegeling

Name : Paul Andries Zegeling  
Dept. : [Mathematics](#)  
[Utrecht University](#)  
the Netherlands  
Room : MI 513  
Email : P.A.Zegeling AT uu DOT nl  
Phone : 030-2533720



**My H(irsch)-index = 14 (via google scholar citations)**  
[Here](#) you can find an explanation of this number.

**My i10-index = 20 (via google scholar citations)**  
[Here](#) is an explanation of this number.

==> see also [this](#) page.

The following numbers may be of interest as well:

**Z(egeling)-numbers = 0, 4 AND 6(!)**  
**K(aplan)-number = Z**  
**E(instein)-number = 5**  
**G(auss)-number = 7**  
**N(ewton)-number = oo (fortunately this is a universal constant!)**

RESEARCH:

Paul Zegelingkamer 513, wiskundegebouwP.A.Zegeling@uu.nl, 030-2533720

Moleculaire Modelling & Wiskunde

I AM CO-AUTHOR/EDITOR OF THE BOOK (April 2011):



[HET VUUR VAN VU](#)

---

I participate in the following projects:

- [NUPUS](#)
- [BRICKS](#)
- [NWO-Wiskunde-Toegepast](#)
- [China-UU-programme](#)

---

I am one of the organizers of the [Stafcolloquium](#).

---

I was co-organizer of the [NUPUS "Tau-meeting" in Eindhoven \(July 17, 2009\)](#)

- brief [biography](#)
- more info on [adaptive moving grid methods](#)
- list of [publications](#)
- supervised [students](#)
- meetings in [2011](#) [2012](#) [2013](#)

---

---

I was one of the organizers of the [STUDY GROUP MATHEMATICS WITH INDUSTRY 2007](#)

---

---

**ONDERWIJS INFO:**

- [SK.BMOWI](#) [Moleculaire Modelling & Wiskunde \(voor chemici\)](#), blok 2, 2012-2013
- [wisB251](#) [Numerieke Wiskunde DEEL I](#), blok 2 2012-2013
- [wisL602](#) [Numerical Methods for Time-Dependent PDEs, periods 3 & 4, spring 2013](#) (website available: January 2013)

## Moleculaire Modelling & Wiskunde, 2012-2013

(het wiskundegeedeelte van de cursus)

Docent: Dr. P.A. Zegeling (Wiskundegebouw kamer 513, 030-2533720)

Werkcollege-assistenten: Philip Klop, Hasan Kurt en Stephan Bongers

- De behandelde stof per week: [\[overzicht\]](#) (check deze pagina regelmatig)
- Een [\[handout\]](#) (met extra opgaven, oude tentamens etc)
- Eindcijferberekening:  $E = (1 + TH1 + TH2 + TH3) / 6 + 5 * TT / 6$ , waarbij TT het tentamencijfer is en de cijfers voor de thuisopdrachten TH1, TH2 en TH3 ieder maximaal 3 punten kunnen opleveren

De [\[inrolezing\]](#) van woensdag 14 november 2012

THUISOPDRACHTEN (NIET per email inleveren!!):

- Thuis [\[opdracht\\_1\]](#) (inlever-deadline \*\*\*dag \*\* november 2012 \*\*00)
- Thuis [\[opdracht\\_2\]](#) (inlever-deadline \*\*\*dag \*\* december 2012 \*\*00)
- Thuis [\[opdracht\\_3\]](#) (inlever-deadline \*\*\*dag \*\* januari 2013 \*\*00)

Vragenuur: \*\*\*dag \*\* januari, \*\*, \*\*, \*\*, \*\*

Oud tentamen voordoen: \*\*\*dag \*\* januari, Zaal \*\*\*, \*\*, \*\*, \*\*, \*\*

Behandeld worden de tentamens [\[tentamen van \\*\\*\\*\\*\\*\]](#) en [\[herkansing van \\*\\*\\*\\*\\*\]](#) (LET OP svp: de stof kan per jaar wat verschillen!!)

- EXTRA informatie over de Verlet-integratie methode; klik [\[hier\]](#)
- EXTRA Mathematica-notebook file i.v.m. Monte-Carlo methoden; klik [\[hier\]](#) en werk dan verder met Mathematica
- EXTRA Mathematica-notebook file i.v.m. Fourier-reeksen; klik [\[hier\]](#) en werk dan verder met Mathematica
- De roosters (cursus/tentamen) bij [\[scheikunde\]](#)
- De stof voor het tentamen = de stof behandeld in [\[het overzicht\]](#)
- Bij het tentamen mag je gebruiken: het boek van STEINER, de HANDOUT en een REKENMACHIENJE; maar GEEN aantekeningen, uitwerkingen van opgaven, andere boeken, laptops!
- Voor vragen over het scheikundegeedeelte van deze cursus zie [\[deze webpagina\]](#)



Paul Zegeling  
Department Wiskunde  
Universiteit Utrecht  
tel: 030-2533720

### Moleculaire Modellerings & Wiskunde (wiskundegedeelte), blok 2, 2012/2013

Boek: E. Steiner (St); The Chemistry Maths Book; 2e editie.

#### De stof die wordt behandeld op het hoorcollege en het werkcollege:

Last update: 10-11-12; 13:14

LES 1: Vrijdag 16-11-'12 9:00-10:45 (bijbehorend <b>werkcollege: 11:00-12:45</b> )	Hoorcollege: St 9.1 t/m 9.3, 9.6, 16.5 t/m 16.9 Werkcollege: opgaven E1, E3, E4; H9: 1, 4, 5, 7, 12, 14; H16: 19, 20, 23, 24, 48, 50, 51, 52, 54, 55, E0
LES 2: Vrijdag 16-11-'12 13:15-15:00 (bijbehorend <b>werkcollege: 15:15-17:00</b> )	Hoorcollege: St. 7.6 & 7.7 + diktaat hoofdstuk over Taylor (+ thuisopdracht 1; zie webpagina!) Werkcollege: opgaven T1 (convergentiestraal: hoeft niet), T2 a) b) c), T3, T6, T7, T12, T13 (extra: T9, T10)
LES 3: Vrijdag 23-11-'12 9:00-10:45 (bijbehorend <b>werkcollege: 11:00-12:45</b> )	Hoorcollege: Werkcollege:
LES 4: Vrijdag 23-11-'12 13:15-15:00 (bijbehorend <b>werkcollege: 15:15-17:00</b> )	Hoorcollege: Werkcollege:
LES 5: Vrijdag 30-11-'12 9:00-10:45 (bijbehorend <b>werkcollege: 11:00-12:45</b> )	Hoorcollege: Werkcollege:
LES 6: Vrijdag 30-11-'12 13:15-15:00 (bijbehorend <b>werkcollege: 15:15-17:00</b> )	Hoorcollege: Werkcollege:
LES 7: Vrijdag 7-12-'12 9:00-10:45 (bijbehorend <b>werkcollege: 11:00-12:45</b> )	Hoorcollege: Werkcollege:
LES 8: Vrijdag 7-12-'12 13:15-15:00 (bijbehorend <b>werkcollege: 15:15-17:00</b> )	Hoorcollege:

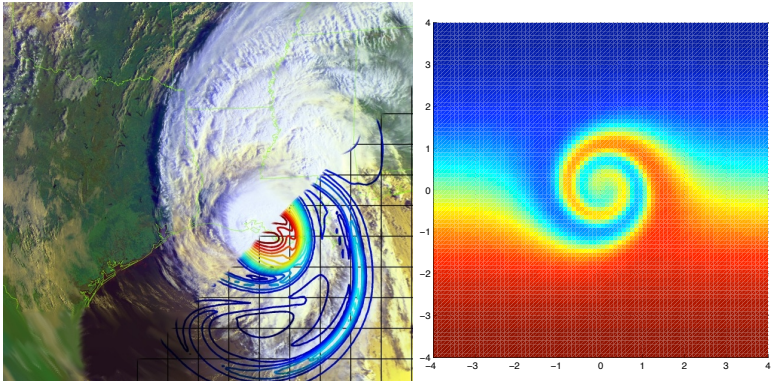


# Toepassingsgebieden

- chemische reacties (reactie-diffusie)
- weersvoorspelling (meteorologie)
- stromingen in rivieren en de zee (waterloopkunde)
- moleculaire dynamica
- ontwerp vliegtuigen (hd)
- kernfusie (mhd, plasmafysica)
- zonnewind (mhd, astronomie)
- ETCETERA!!!

VOORBEELDEN volgen ~>

# Weersvoorspelling: orkanen! (1)



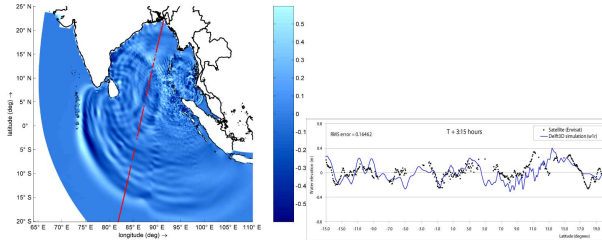
## Weersvoorspelling: orkanen! (2)

$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{\partial(uT)}{\partial x} + \frac{\partial(vT)}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} &= 0 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla \cdot [(u, v)^T T] &= 0 \\ \nabla \cdot (u, v)^T &= 0 \end{aligned}$$

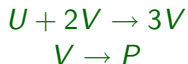
# Simulatie van een tsunami



$$\begin{aligned} \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}[u(h - h_B)] + \frac{\partial}{\partial y}[v(h - h_B)] &= 0 \\ \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial u}{\partial y} - fv &= -g \frac{\partial h}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} + fu &= -g \frac{\partial h}{\partial y} \end{aligned}$$

# Reactie-diffusievergelijkingen (1)

Chemische reacties ( $U$ ,  $V$  en  $P$  zijn chemische stoffen):

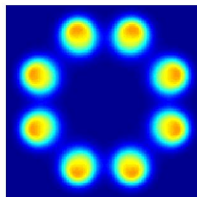
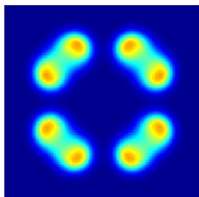
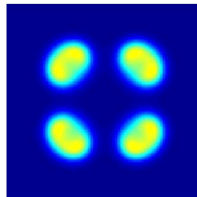
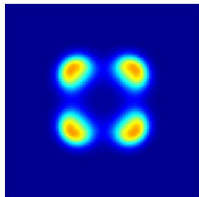


Bijbehorende differentiaalvergelijkingen ( $u$  en  $v$  zijn concentraties,  $r_u$  en  $r_v$  diffusieconstanten,  $f$  en  $k$  reactiesnelheden):

$$\begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial t} = r_u \Delta u - uv^2 + f(1 - u) \\ \frac{\partial v}{\partial t} = r_v \Delta v + uv^2 - (f + k)v \end{array}$$

$$\text{div}(\text{grad}) = \Delta = \nabla \cdot \nabla = \nabla^2$$

# Reactie-diffusievergelijkingen (2); patroonvorming!

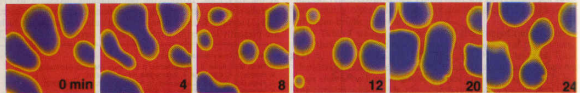


# Reactie-diffusievergelijkingen (3); experimenten



## LETTERS TO NATURE

### Laboratory experiment



### Numerical simulation

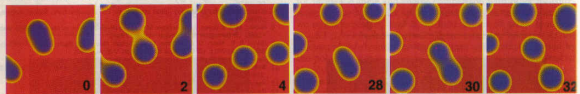
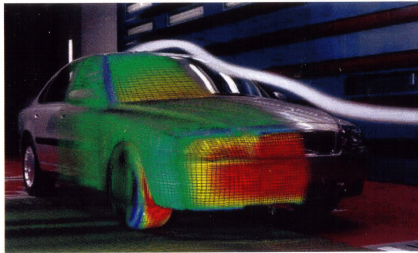


FIG. 1 The upper row of images shows the evolution of a chemical pattern observed in a laboratory experiment, and the lower row shows similar behaviour found in a numerical simulation of a reaction-diffusion model (see text). The behaviour illustrated here continues indefinitely, as long as the reactor conditions are maintained. In the experiment, blue (red) represents a state of high (low) pH, and the domain size is 7 mm  $\times$  7 mm. The concentrations of the reagents fed into the reservoir that is in contact with the gel reactor are (in mM):

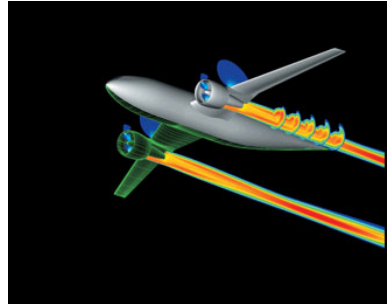
[NaO<sub>2</sub>]=75.0, [Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>]=89.0, [H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>]=3.6, [NaOH]=0.25 and [K<sub>4</sub>Fe(CN)<sub>6</sub>·3H<sub>2</sub>O]=36.4. The total input flow rate is 86.4 ml h<sup>-1</sup>, and the reactor temperature is 30 °C. The dimensionless parameter values for the numerical simulation are  $A=0.02$ ,  $B=0.079$  and  $D_x=2 \times D_y=2.0 \times 10^{-5}$ ; each panel shows a 150  $\times$  150 pixel region from a domain of 512  $\times$  512 pixels. The images from the simulation are coded red ( $U=1$ ,  $V=0$ ) and blue ( $U=0.3$ ,  $V=0.25$ ) and are labelled with dimensionless time/100.



# Ontwerp van auto's, vliegtuigen, etc $\rightsquigarrow$



Numerical solution of the Navier-Stokes equations





# De Euler vergelijkingen

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ \rho uv \\ u(E + p) \end{pmatrix} + \frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho uv \\ \rho v^2 + p \\ v(E + p) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$\rho$  : dichtheid

$(\rho u, \rho v)^T$  : momentum vector

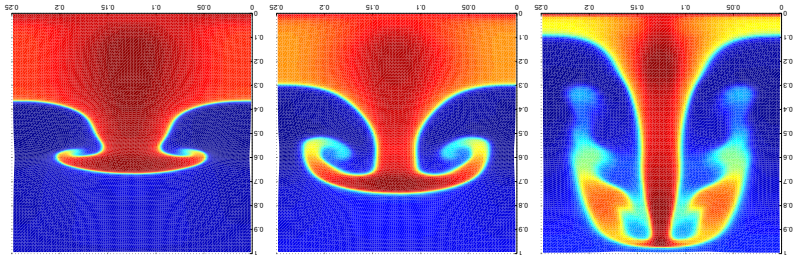
$E$  : totale energie

$p$  : druk =  $(\gamma - 1)(E - \rho \frac{u^2 + v^2}{2})$

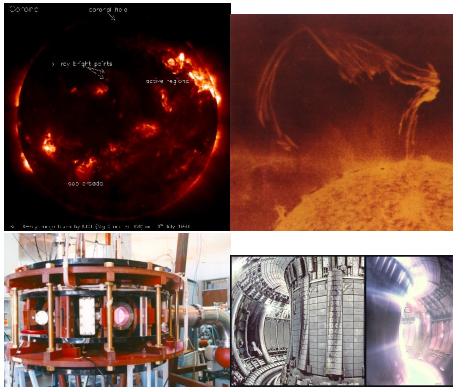
Schrijf dit als:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{\partial \mathcal{F}_1(Q)}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{F}_2(Q)}{\partial y} = \frac{\partial Q}{\partial t} + \operatorname{div} \begin{pmatrix} \mathcal{F}_1 \\ \mathcal{F}_2 \end{pmatrix} = 0$$

# Rayleigh-Taylor instabiliteit



# Magneto-hydrodynamica (1): zonnevlammen en tokamak-reactor ~→



## Magneto-hydrodynamica (2): behoudswetten

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0$$

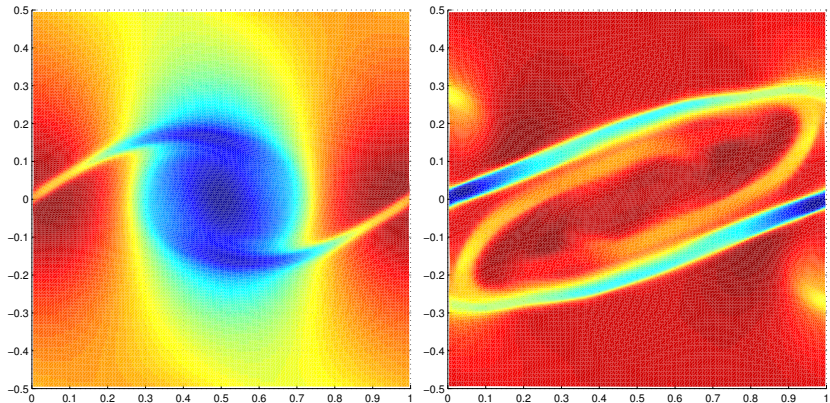
$$\frac{\partial(\rho \mathbf{v})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v} \mathbf{v} - \mathbf{B} \mathbf{B}) + \nabla p_{tot} = 0$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} e + \mathbf{v} p_{tot} - \mathbf{B} \mathbf{B} \cdot \mathbf{v}) = \eta_m (\nabla \times \mathbf{B})^2$$

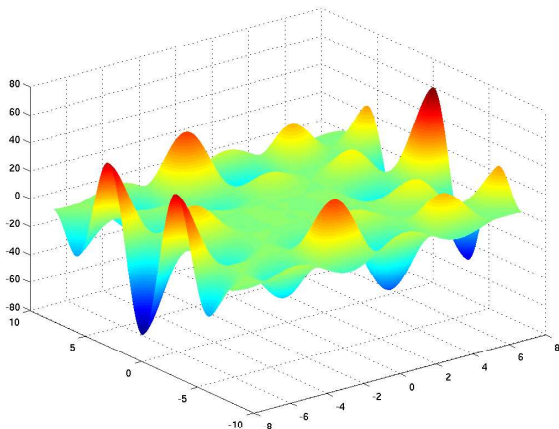
$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{v} \mathbf{B} - \mathbf{B} \mathbf{v}) = \eta_m \Delta \mathbf{B} \quad \text{extra eis : } \text{div}(\mathbf{B}) = 0$$

$$p_{tot} = p + \frac{\mathbf{B}^2}{2}, \quad p = (\gamma - 1) \left( e - \rho \frac{\mathbf{v}^2}{2} - \frac{\mathbf{B}^2}{2} \right)$$

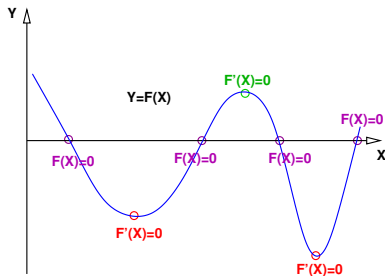
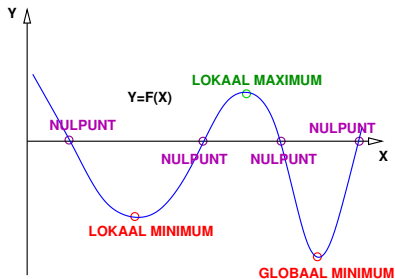
# Kelvin-Helmholtz instabiliteit



# Minimaliseren van energieoppervlakken



# Minimum van een functie



# Methode van Newton voor $f(x) = 0$

$ax^2 + bx + c = 0 \Rightarrow x$  volgt uit *abc*-formule

Algemene  $f(x) = 0 \Rightarrow x = ???$

Via benaderingen  $x \approx x_i$  uit:

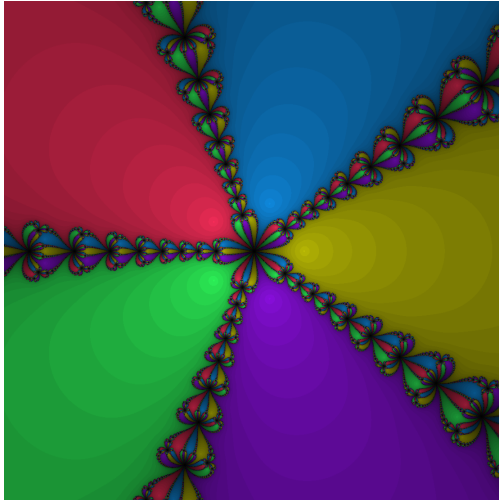
$x_0$  te kiezen...

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f'(x_i)}$$

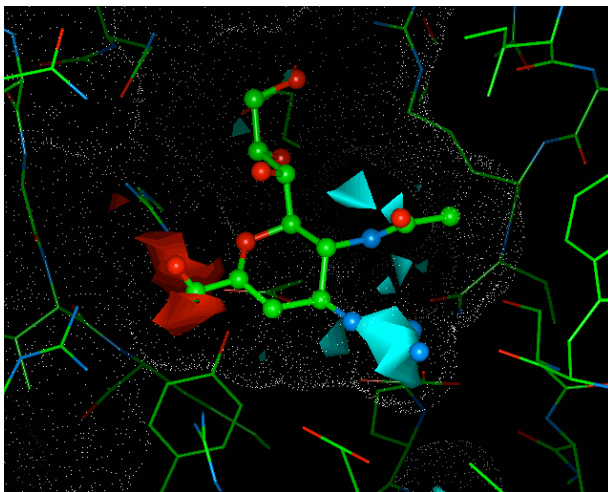
Waar komt deze formule vandaan? Zijn dit goede benaderingen?  
Hoe goed? Bij welke  $i$  moeten we het proces stoppen? Kan dit  
ook voor een minimum? In meerdere dimensies? etc



# Methode van Newton voor complexe functies



# Moleculaire dynamica (1)



## Moleculaire dynamica (2)

Pendulum (zonder wrijving) met massa=1, lengte=1:

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \sin(x) = 0$$

Noem:

$$q = x, \quad p = \frac{dx}{dt} \implies$$

$$\begin{aligned} \frac{dq}{dt} &= p \\ \frac{dp}{dt} &= -\sin(q) \end{aligned}$$

$$\text{energie} = \frac{1}{2}p^2 - \cos(q)$$

## Moleculaire dynamica (3)

- ★ Gezocht: de oplossingen  $q(t)$  en  $p(t)$
- Helaas: er zijn geen exacte formules voor te geven...
- ★ Daarom gaan we ook hier benaderen:
  - verdeel de tijd in eindig veel stukjes ter lengte  $\Delta t$
  - noem  $t^0 = 0$ ,  $t^1 = t^0 + \Delta t$ ,  $t^2 = t^1 + \Delta t$ , ... t/m de eindtijd  $T$
  - noem de benaderingen in  $t^n$ :

$$q^n \approx q(t^n), \quad p^n \approx p(t^n)$$

# Moleculaire dynamica (4) via Taylorontwikkelingen!

## Numerieke methoden:

Euler-Forward:

$$\begin{aligned}q^{n+1} &= q^n + \Delta t p^n \\p^{n+1} &= p^n - \Delta t \sin(q^n)\end{aligned}$$

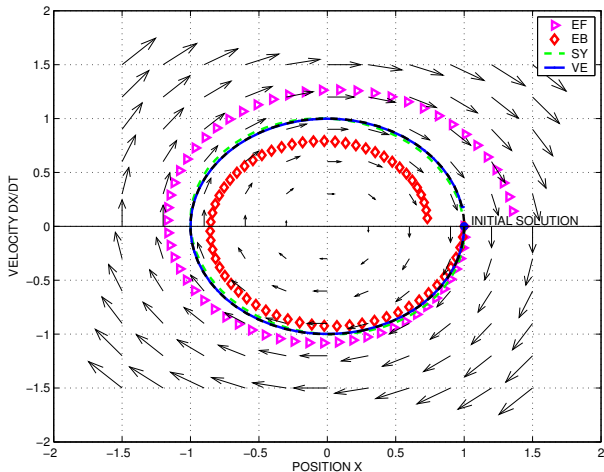
Euler-Backward:

$$\begin{aligned}q^{n+1} &= q^n + \Delta t p^{n+1} \\p^{n+1} &= p^n - \Delta t \sin(q^{n+1})\end{aligned}$$

Symplectic-Euler:

$$\begin{aligned}q^{n+1} &= q^n + \Delta t p^n \\p^{n+1} &= p^n - \Delta t \sin(q^{n+1})\end{aligned}$$

# Moleculaire dynamica (5)



# Moleculaire dynamica (6)

