

Computational Science

Arthur van Dam

September 2001

Wat is Computational Science? Alleen de naam al levert vragende blikken op. Twee van mijn favorieten zijn om dan te zeggen 'Toegepaste Wiskunde', of 'een combi van Wiskunde, Natuurkunde en Informatica'. De nieuwe studenten zullen inmiddels wel ongeveer weten wat CS is. Maar wat kan er inhoudelijk verwacht worden? Aan de hand van 2 voorbeelden van CS-practica, enkele onderwerpen uit hogere jaren en afstudeerprojecten zal ik proberen hiervan een beeld te schetsen.

In het eerste jaar wordt veel wis- en natuurkundige basiskennis behandeld: integreren, limieten, elektrische weerstanden en relativistische krachtwetten. In de volgende jaren wordt dit verder uitgebreid, en in de jaarlijkse CS-practica worden veelzijdige, steeds realistischer toepassingen behandeld.

Satellietruis en MP3's

Een grondtoon is een geluidsgolf met één bepaalde frequentie en amplitude. Elk geluid is samengesteld uit diverse frequenties. Deze samenstelling is in feite een optelling, een *superpositie* van grondtonen, elk met een eigen frequentie en amplitude.

Omgekeerd is het juist interessant om te kijken uit welke grondtonen een bepaald geluid is opgebouwd. Dit laatste gebeurt met *Fourier-analyse*.

Het gegeven signaal wordt voorgesteld door een periodieke functie $f(t)$. De grondtonen worden voorgesteld door complexe machten:

$$e^{int} = \cos(nt) + i \sin(nt),$$

waarin n een index is die aangeeft om welke grondtoon het gaat en i de imaginaire eenheid is: $i = \sqrt{-1}$.

De mate waarin een grondtoon in het invoersignaal f voorkomt, wordt bepaald door

de amplitude van deze frequentiecomponent: c_n . Het aantal grondtonen is oneindig, dus f is opgebouwd als een oneindige som over alle gehele getallen n :

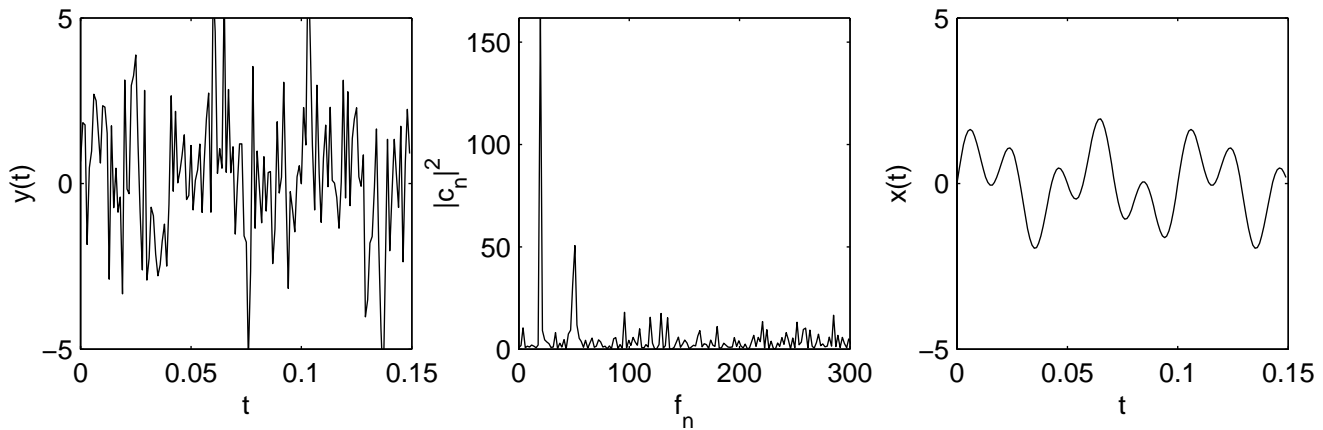
$$f(t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} c_n e^{int}$$

Fourier-analyse is een eenvoudige methode om achter de waarden van de c_n te komen, er is echter wel veel rekenwerk voor nodig. Deze methode is dan ook pas in het computertijdperk echt aan bod gekomen.¹ Voor computerberekeningen moet het invoersignaal als een reeks *samples* ingevoerd worden en wordt ook een eindig aantal Fouriercoëfficiënten c_n bepaald. De discrete formules worden nu niet uitgewerkt.

Fourier-analyse wordt veel gebruikt voor het filteren van ruis uit een signaal. Bijvoorbeeld ruis in een radiosignaal of in satellietbeelden. We kunnen op de computer een aantal grondtonen genereren, zeg 20 en 50 Hz. Wanneer we hieraan kunstmatig ruis toevoegen ontstaat een onduidelijk signaal (figuur 1, links). Wanneer we hiervan de Fouriergetransformeerde bepalen, en de c_n kwadrateren², zien we bij 20 Hz en 50 Hz twee hoge energiepieken, de ruis is alom aanwezig, maar veel minder sterk (figuur 1, midden).

¹Gauss deed in de eerste helft 19^e eeuw overigens vergelijkbaar rekenwerk wél met de hand.

²Eigenlijk $c_n \cdot \bar{c}_n$.



Figuur 1: Ruisverwijdering met Fourier-transformatie. Links het signaal van 20 Hz en 50 Hz met ruis, midden de energie voor iedere frequentiecomponent, rechts het signaal met weggefilterde ruis.

Door nu alleen de waarden van c_n bij de twee pieken te nemen en dit *terug* te transformeren, verkrijgen we het oorspronkelijke, ongestoorde signaal (fig. 1, rechts).

Ook in de op dit moment zo actuele MP3-techniek wordt Fourier gebruikt. Uit het oorspronkelijke signaal wordt 'irrelevante data' weggefilterd, zoals ruis en voor de mens onhoorbare tonen (de hoge frequenties). Dit levert al kleinere bestanden op, vervolgens worden nog compressietechnieken gebruikt, die losstaan van Fourier.

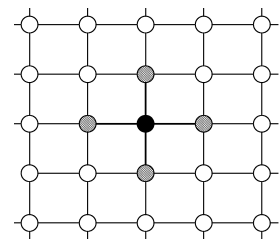
Bodemverontreiniging

Eén van de meest voorkomende onderwerpen in Computational Science zijn (stelsels van) differentiaalvergelijkingen. Bij het oplossen hiervan worden benaderingsmethoden gebruikt, zodat numerieke fouten optreden. In iteratieve methoden kunnen deze een heel eigen leven gaan leiden, de oplossing kan exploderen.

De beschrijving van een grondwaterstelsel, inclusief verspreiding van gifstoffen, levert ook een stelsel van differentiaalvergelijkingen. We beschouwen een plat, rechthoekig gebied D , er vindt dus geen transport in de diepte plaats. De gifconcentratie ψ wordt bepaald door de verplaatsing van

het gif (*diffusie*), afhankelijk van de concentratieverschillen en de doorlaatbaarheid van de grond ter plaatse, de stroming van het grondwater (*convectie*), natuurlijke afbraaksnelheid van het gif en eventueel brontermen, zoals fabriekspijpen.

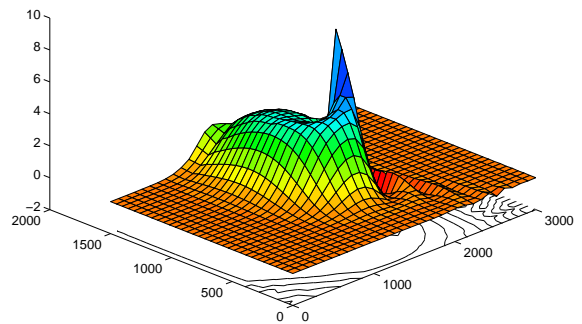
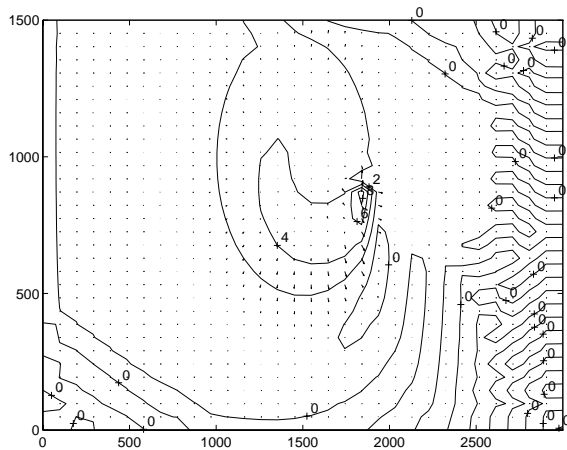
Zoals altijd moet het probleem gediscetiseerd worden: domein D wordt bekeken op de roosterpunten van een denkbeeldig rechthoekig rooster over D . De gediscetiseerde diffusie- en convectie-termen in een bepaald punt (x, y) bevatten functiewaarden van de buurpunten. De diffusie- en convectie-coëfficiënten vertalen zich in zogenaamde *koppelingscoëfficiënten*.



Wanneer alle roosterpunten in één lange vector worden geplaatst, levert dit een matrix-vector vergelijking op:

$$Ax = b.$$

Hierin bevat A de koppelingscoëfficiënten, x de concentraties ψ en b de brontermen. Gedacht moet worden aan een A ter grootte 1000×1000 , dus een exacte, directe oplosmethode zal veel te veel rekentijd kosten.



Figuur 2: Verspreiding van geloosd gif in de bodem. Links het stromingsveld van het gif, rechts de gifconcentratie.

We zullen dus *iteratieve methoden* gebruiken; technieken waarin door herhaald een 'probeeroplossing' bij te stellen een steeds betere benadering van de echte oplossing wordt gevonden. Door dit herhaaldelijk bijstellen kunnen numerieke fouten wel steeds verder voortgeplant worden. In figuur 2 is de gevonden oplossing te zien van een fictief verontreinigingsprobleem. Het gaat hier om een stuk grond van 3000 bij 1500 m, met een rechte rivier van $(2500, 0)$ naar $(1000, 1500)$. De bodemdoorlaatbaarheid aan de ene zijde van de rivier verschilt van die aan de andere zijde. In $(1900, 900)$ wordt door een pijp gif in de grond gepompt. Tenslotte is er een ovaalvormige grondwaterstroming rechtsom het punt $(1500, 1000)$.

De figuur toont links het stromingsveld van het gif en rechts de gifconcentratie. Behalve dat het gif vanuit de bron zich rechtsomdraaiend verspreidt, zijn op de oostrand onnatuurlijke 'rimpels' te zien, deze zijn het gevolg van numerieke fouten. Door methoden af te stemmen op hun toepassingsgebied en (discretisatie-) parameters aan te passen, wordt geprobeerd zo goed mogelijke resultaten te verkrijgen. Hierbij speelt ook de prijskwaliteit-kwestie een rol: welke nauwkeurigheid levert een methode, en hoeveel rekentijd is hiervoor nodig.

Hogere jaren

In de hogere jaren komen behalve meer geavanceerde ook meer diverse onderwerpen aan de orde. Er is steeds meer ruimte voor keuzevakken bij andere faculteiten, en ook binnen de faculteit worden onderwerpen uit andere vakgebieden aangesneden.

Zo werd voor het derdejaars CS-project in 2000 samengewerkt met het Universitair Medisch Centrum Utrecht (UMCU). We hebben geëxperimenteerd met een nieuwe oplostechniek, die gebruikt zou kunnen worden bij het verwerken van meetgegevens van medische CT-scans. (zie ook: [4])

In het vierde jaar werd een academische bedrijfs-situatie nagespeeld. Er werden door de fictieve opdrachtgever enkele hints gegeven over het fenomeen '*pseudospectra*'. Opdracht was om de wiskundige achtergrond uit te zoeken en te kijken naar de toepasbaarheid in een zelf gekozen *real-world-toepassing*. Het daarbij ontwikkelde MATLAB-programma is door een engelse expert op dit gebied op enkele lezingen aangeprezen. (zie ook: [3])

De opleiding Computational Science, gestart in 1995, heeft sinds september 1999 een 5-jarig programma. Natuurlijk wordt de studie afgesloten met een afstudeer-project.

Afstuderen

De beschreven voorbeelden zijn slechts een zeer kleine greep uit de onderwerpen die tijdens de studie aan bod komen. Daarom tot slot nog een aantal voorbeelden van afstudeeronderwerpen, om een beeld te geven waar de studie uiteindelijk toe kan leiden.

Bij diverse externe instanties zijn afstudeerstages gedaan, zie ook [1]. In samenwerking met het Waterloopkundig Laboratorium Delft is een simulatieprogramma voor een wildwaterbaan gemaakt.

Naar een opdracht van Stichting Wetenschappelijk Onderzoek Verkeersveiligheid is onderzoek gedaan naar de effectiviteit van een aantal profielen voor vangrails, met bijbehorende botsing-simulaties.

Van mijn eigen jaargang is in september 2001 iemand afgestudeerd op numerieke oplosmethoden voor de gradiëntvergelijking. Het is dus ook zeer goed mogelijk om meer theoretisch wiskundig bezig te zijn bij CS. Een tweede gaat bij Philips werken aan eigenwaardenproblemen die corresponderen met elektronische circuits. Zelf ga ik aan de slag bij TNO met numerieke simulatie van fileverschijnselen aan de hand van nieuwe verkeersmodellen.

CS is dus heel veelzijdig, tijdens je studie

krijg je langzaam maar zeker door in welk toepassingsgebied je interesse ligt, en met een beetje inspanning is hier vaak een aantrekkelijk, bijpassend afstudeeronderwerp bij te vinden.

Meer informatie

Geïnteresseerd in uitgebreidere informatie over CS? Kijk dan eens op de diverse homepages van CS studenten of bezoek een afstudeervoordracht. Op mijn homepage zijn een aantal interessante applets en links naar homepages van een aantal CS-studenten te vinden. Meer informatie is ook te vinden via de homepage van CS, www.math.uu.nl/cs, en onderstaande referenties.

Referenties

- [1] Afstudeerstages bij CS,
<http://www.math.uu.nl/cs/stages/>
- [2] Simulaties bij CS,
<http://www.math.uu.nl/cs/sims/sims.html>
- [3] Group Project CS 2000-2001: Pseudospectra,
<http://www.math.uu.nl/cs/mpc/>
- [4] Studie-pagina auteur
<http://www.eye-home.net/science.php>