



# Beräkningsvetenskap

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Informationsteknologi





Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Informationsteknologi

- Beräkning av satellitbanor
- Simulering av luftflöde kring flygplan
- Simulerad krocktest av bilar
- Hållfasthetsberäkningar
- Väderleksprognoser
- Simulering av förbränning, t ex i motor
- Simulering av föroreningstransport i naturen
- Bildanalys ("förbättra" bilder, hitta mönster)
- Bestämning av molekylstrukturer hos proteiner
- Molekyldynamik

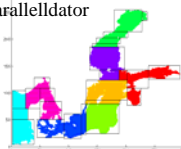
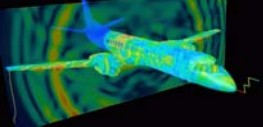
...och mycket mycket mer

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se


**Vad är beräkningsvetenskap?**

Informationsteknologi

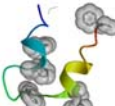
Partitionering vid beräkning på paralleldator

Simulering av blixtnedslag i SAAB 2000



Krocksimulering



Simulering av proteinveckning

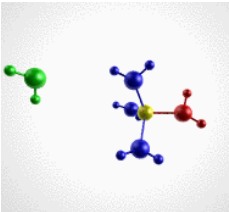
Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Informationsteknologi

Molekyldynamik

Här: studier av utbytesmekanismer och utbyteshastigheter mellan vattenmolekyler runt en litiumjon (i vatten)



Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Informationsteknologi

Veckning av HIV-virus



Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Simulering av bålgetings flygförmåga



Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

Tillämpningarna är exempel på problem som kan beskrivas med *matematiska modeller*

**Problem!**  
Kan som regel inte lösas analytiskt, på "vanligt" sätt.

**Lösning:**  
Lös problemet på dator – måste använda *numeriska lösningsmetoder*.

**Resultat:**  
Ger approximativ lösning.

Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

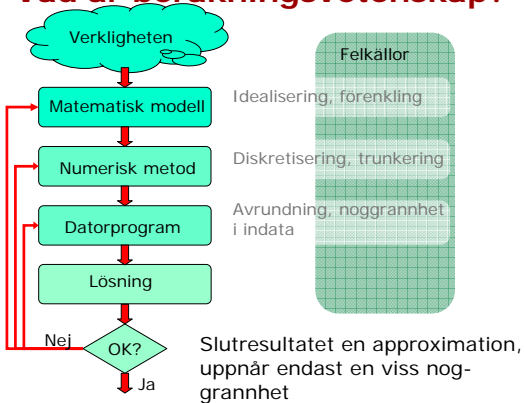
**Vad är beräkningsvetenskap?**



Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**



Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

**Ett (trivialt) exempel**  
Beräkna arean på jorden med den matematiska modellen  $A=4\pi r^2$

Innehåller flera approximationer och fel:

- Jorden approximeras av en sfär – idealisering av jordens verkliga yta
- Värdet på radien baseras på empiriska mätningar och tidigare beräkningar
- Värdet på  $\pi$  kräver trunkering (avhuggning) av oändlig decimalutveckling
- Indata och resultat avrundas av datorn

Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

**Vad är beräkningsvetenskap?**

**Ett mer realistiskt exempel**

*HIV-viruset bildar mutanter. Immunsystemet bildar en specifik lymfocyt för viruset och mutanterna. Dessutom finns en immunrespons för hela immunsystemet.*



*Beräkna populationstillväxten för virus, lymfocyten och immunrespons med avseende på tid.*

Informationsteknologi

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Matematisk modell

$$v_1'(t) = (a - bz(t) - cx_1(t))v_1(t)$$

$$v_2'(t) = (a - bz(t) - cx_2(t))v_2(t)$$

$$x_1'(t) = gv_1(t) - kx_1(t)(v_1(t) + v_2(t))$$

$$x_2'(t) = gv_2(t) - kx_2(t)(v_1(t) + v_2(t))$$

$$z'(t) = (d - kz(t))(v_1(t) + v_2(t))$$

$v_1$  = population av HIV-virus  
 $v_2$  = population av 1:a mutanten  
 $x_1$  = population av lymfocyt mot viruset  
 $x_2$  = population av lymfocyt mot 1:a mutant  
 $z$  = immunrespons

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Matematisk modell

- Modellen är en förenkling av verkligheten
- Kan lägga in fler mutanter för att göra den mer realistisk – blir då mer komplicerad
- Svårt bestämma parametrarna  $a, b, c, \dots$ . Kan variera med olika personer. Görs ofta empiriskt.
- Svårt eller omöjligt att göra en modell som helt överensstämmer med verkligheten

Slutsats: Modellen en approximation av verkligheten!

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Numerisk metod

**Problem!**  
 Kan ej lösas med vanliga "matematiska" (analytiska) metoder. Vi använder istället en *numerisk metod*.

- Numeriska metoder bygger i detta fall på *diskretisering*, dvs kontinuerliga intervall ersätts med diskreta punkter. Beräkning sker endast i dessa punkter – medför *diskretiseringsfel*
- Metoderna har olika egenskaper och kan vara bra ur en synvinkel men dåliga ur en annan. Exempelvis kan en viss metod vara *effektiv* (snabb), men i vissa lägen vara *instabil*

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Datorprogram

- Implementera metoden, dvs skriv program för den numeriska metoden (C++, Java, MATLAB,...)

eller

- Använd befintlig programvara, t ex MATLAB

Ofta krävs en kombination av båda!

- Indata till programmet, t ex  $a, b, c, \dots$ , baseras vanligen på mätningar och är inte exakta
- Krävs ett initialtillstånd, t ex antal HIV-virus vid tiden  $t=0$ . Detta mäts ej exakt utan innehåller fel
- Datorn avrundar alla beräkningar

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Lösning

- Lösningen OK?
- Tolka resultat
- Tillräckligt effektivt och snabbt?
- Är felet tillräckligt litet?

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Beräkningsvetenskapens sammanhang

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Vad är beräkningsvetenskap?

### Frågeställningar inom beräkningsvetenskap

Exekveringstid?  
Minnesutnyttjande?  
Vilken typ av dator?

Noggrannhet?  
Stabilitet?  
Kondition?

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Ämnets historia

1945	Den moderna datorn
1960-tal	Professurer i numerisk analys
1975-2000	Ett tvärvetenskapligt område tar form
2000-tal	Begreppet beräkningsvetenskap etableras

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Kursens mål

För godkänt betyg ska studenten kunna

- redogöra för de grundläggande begreppen algoritm, diskretisering, noggrannhet, noggrannhetsordning, stabil- resp ickestabil algoritm, maskinepsilon, diskretiseringsfel (trunkeringsfel), iteration, kondition;
- översiktligt förklara idén bakom de algoritmer som behandlas i kursen;
- Visa hur algoritmerna som behandlas kan användas för lösning av tillämpningsproblem
- Redogöra för skillnaden i metodik vid datorberäkningar i jämförelse med analytisk lösning och de effekter som flyttalsrepresentation och diskretisering medför;

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Kursens mål, forts

- Använda grundläggande programmeringsstrukturer (if, while, for) i algoritmer och i programmeringskod vid problemlösning;
- Givet ett mindre beräkningsproblem, strukturera och dela upp i underproblem, formulera algoritm för lösning av problemet, samt implementera i ett programmeringsspråk
- Redogöra för hur parametrar överförs till funktioner samt skillnaden mellan globala och lokala variabler i program
- Förstå enkel programmeringskod och skriva egna välstrukturerade mindre beräkningsprogram

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se

Informationsteknologi

UPPSALA UNIVERSITET

## Mål, forts

- I en mindre rapport förklara och sammanfatta lösningsmetoder och resultat på ett överskådligt sätt.

Institutionen för informationsteknologi | www.it.uu.se