Verslagen van de Studiegroep

Wiskunde met de Industrie 2009

Verslagen van de
Studiegroep Wiskunde met de Industrie 2009

Wageningen
26-30 januari 2009

Bennie Mols

De Studiegroep Wiskunde met de Industrie is financieel gesteund door:

De Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek (NWO) Technologie Stichting STW
Centrum voor Wiskunde & Informatica (CWI)
European Consortium for Mathematics in Industry (ECMI)
Biometris, Wageningen Universiteit en Researchcentrum

Voorwoord

In deze uitgave treft u verslagen aan van de "Studiegroep Wiskunde met de Industrie (SWI 2009)", die plaats vond in Wageningen in de week 26 – 30 januari 2009.
De verslagen zijn geschreven door wetenschapsjournalist Bennie Mols en bedoeld voor een breed publiek. In deze uitgave heeft hij er nadrukkelijk voor gezorgd dat de problemen, de algemene aanpak en de resultaten helder gepresenteerd worden. De wetenschappelijke verslagen, waarin de gebruikte wiskundige modellen en methoden uitvoerig staan beschreven, zijn gebundeld in een andere uitgave.
Tijdens een SWI werkt een groep wiskundigen samen met industriële partners aan problemen die vanuit de industrie ingebracht zijn. De problemen zijn open geformuleerd, wat inhoudt dat er nog een vertaalslag nodig is van het probleem naar een wiskundig model. Tijdens een SWI ligt de nadruk dan ook op wiskundig modelleren. De deelnemers werken in groepen aan een probleem, waarbij er per groep specialisten uit diverse hoeken van de wiskunde samenwerken. Juist dit samenwerken blijkt een grote meerwaarde op te leveren. Het enthousiasme is daarbij zo groot dat er lang en intens gewerkt wordt om in de korte tijd van enkele dagen tastbare resultaten te boeken. Op maandag worden de problemen aan de deelnemers gepresenteerd door de industriële partners en op vrijdag worden de resultaten en voorspellingen van de modellen gepresenteerd door de wiskundigen en het is altijd weer verbazend hoe ver men dankzij teamwerk doorgaans komt.
De traditie van het organiseren van zulke Studiegroepen bestaat in Nederland sinds 1998 en stamt uit Engeland, waar in 1968 in Oxford de eerste Studiegroep plaats vond. Het concept werd zo'n succes, dat er tegenwoordig studiegroepen op vele plaatsen in de wereld bestaan. Zie bijvoorbeeld de website http://miis.maths.ox.ac.uk. De Europese studiegroepen worden strikt doorgenummerd en SWI 2009 was ook de 67ste "European Study Group with Industry (ESGI)".
De problemen tijdens SWI 2009 werden aangedragen door DSM, RABOBANK, ALBEMARLE, DHV, MARIN en KNMI en betroffen respectievelijk het drogen van verf, het bepalen van optieprijzen, het mengen van chemische stoffen, de aansturing van een opslagsysteem voor drinkwater, het begrijpen van de 'rolbeweging' van schepen en het voorspellen van extreme weersomstandigheden. Kortom, een bonte mix van onderwerpen, maar bij allemaal blijkt wiskunde een essentiële bijdrage te kunnen leveren aan de oplossing.
Als organiserend team danken we iedereen die heeft bijgedragen aan het succes van SWI 2009: de deelnemers, de industriële partners, maar in het bijzonder ook de sponsors. Zoals ze al vanaf 1998 gewoon zijn, hebben ook nu weer STW en NWO een genereuze financiële bijdrage geleverd. De drukkosten zijn voor het grootste deel gesponsord door het CWI in Amsterdam. WUR en ECMI droegen financieel bij en CAN and AIMMS stelden gratis software ter beschikking.
Moge de SWI traditie nog lang voortbestaan!

Het organisatieteam van SWI 2009:

Timo Doeswijk,
Karel Keesman,
Jaap Molenaar,
Hanneke van Ommeren,
Joost van Opheusden,
Dinie Verbeek,
Margaret van Wissen.

Inhoudsopgave

Voorwoord 3

Inhoudsopgave 5

Gevaarlijk slingeren op zee 7

Hete zomerdagen voorspellen in een veranderd klimaat 11

Wiskunde mengt moleculen 15

Opties prijzen met storingsrekening 19

Wiskundige kijk op het droogproces van milieuvriendelijke verven 23

Software optimaliseert pompstrategie drinkwater 27

Gevaarlijk slingeren op zee

Af en toe beginnen grote schepen op zee opeens gevaarlijk hevig rond hun lengteas te slingeren. Een wiskundige analyse geeft inzicht in het hoe en waarom van dit gedrag.

In 1998 voer een groot containerschip over de Stille Oceaan van Taiwan naar Seattle. Het kwam in een hevige storm terecht. Dat zou op zich geen probleem moeten zijn, maar deze keer begon het schip, terwijl de golven recht van voren kwamen, plotseling hevig te schommelen rond de lengteas. Het schommelde van stuurboord naar bakboord met een maximale uitwijking van tegen de veertig graden – een onverwachte vorm van resonantie. Toen de storm was gaan liggen, bleek een derde van de containers overboord geslagen en een derde hevig beschadigd. Dit is het meest extreme voorbeeld tot nu toe van plotseling optredende hevige rolbewegingen van grote schepen om hun lengteas.

In de loop van de afgelopen decennia zijn containerschepen langer geworden en zwaarder beladen, terwijl ze in de breedte vaak niet zijn veranderd. De lengte van zo'n schip kan nu in de buurt liggen van de golflengte van hoge oceaangolven: tweehonderd tot driehonderd meter. Kennelijk kan het dan gebeuren dat er een soort resonantie optreedt die het schip hevig doet rollen. Het Nederlandse maritieme onderzoeksinstituut MARIN in Wageningen onderzoekt onder welke omstandigheden dit gedrag optreedt en wil daaruit leren hoe hevige rolbewegingen voorkomen kunnen worden.

MARIN-onderzoeker Ed van Daalen legt uit hoe raar zulk rolgedrag van een groot schip op het eerste gezicht lijkt: "Als je recht tegen de wind in fietst, dan ga je niet naar links of rechts zwabberen. Als je fietst met zijwind, dan merk je wel dat je gaat zwabberen. Op dezelfde manier verwacht je in eerste instantie niet dat een schip dat de golven precies van voren krijgt, hevig zijwaarts gaat zwabberen. En toch is dat precies wat er gebeurt in een aantal gevallen. Kennelijk ontstaat er een soort mechanische koppeling tussen wat er in verschillende bewegingsrichtingen van een schip gebeurt."

Het MARIN gebruikte tot nu toe numerieke simulatiemodellen die de bewegingsvergelijkingen van zowel de oceaangolven als het schip oplossen. De vorm van het schip wordt daarbij tot in detail gemodelleerd. "Hoewel zo'n model vrij compleet lijkt", vertel Van Daalen, "vinden we er het resonante rolgedrag niet in terug. In de praktijk treedt dit effect wel degelijk af en toe op, maar onze simulatiemodellen voorspellen het niet. Om toch de vinger achter dit probleem te krijgen, hebben we ons gewend tot de Studiegroep Wiskunde met de Industrie. Onze vraag was om niet met een numeriek simulatiemodel, maar met analytische modellen naar het rolprobleem te kijken. We hoopten dat deze andere kijk ons inzicht zou verschaffen in het hoe en waarom van extreme rolbewegingen."

Slingermodellen

Wiskundige Johan Grasman, hoogleraar aan de Wageningen Universiteit, was een van de negen wiskundigen van diverse Europese nationaliteiten die zich een week lang over het MARIN-probleem heeft gebogen. "Wij hebben het rolprobleem vanuit twee verschillende invalshoeken onderzocht", vertelt Grasman. "Eerst hebben we verschillende mechanische modellen opgesteld bestaande uit een massa, een veer en één of twee slingers. Deze modellen worden gebruikt om het gedrag van een schip bij golven van één bepaalde golflengte te beschrijven. Maar in werkelijkheid krijgt een schip op zee natuurlijk te maken met een superpositie van golven met verschillende golflengten. In een tweede, heel andere aanpak, hebben we daarom onderzocht welke stochastische eigenschappen de golven op zee hebben en wat dat stochastische karakter betekent voor het ontstaan van een extreme rolbeweging."

De beweging van een schip dat op de golven op en neer deint, kun je modelleren als een massa die door een periodieke kracht op en neer wordt bewogen. Omdat de beweging van het schip wordt gedempt, wordt de massa met zowel een veer als een zuiger verbonden aan een denkbeeldig op en neer bewegende bodem. In dit mechanische model heeft het schip – voorgesteld als de massa – maar één vrijheidsgraad: het kan alleen omhoog en omlaag bewegen.

De wiskundigen hebben dit model vervolgens uitgebreid naar twee vrijheidsgraden door aan de massa een slinger te bevestigen, die ervoor zorgt dat de massa ook een rolbeweging om zijn lengteas kan maken. Het schip kan nu zowel op en neer bewegen als roteren naar stuurboord en bakboord. Grasman: “In eerste instantie hangt de slinger stil, maar bij bepaalde frequenties van de golven zet de slinger zich in beweging. Uit dit mechanische model hebben we een formule afgeleid die aangeeft boven welke golfamplitude het schip hevig gaat rollen om zijn lengteas en er een gevaarlijke resonantie ontstaat.”

Vervolgens hebben de wiskundigen met deze formule uitgerekend hoe de drempelwaarde van de amplitude afhangt van de frequentie van de golven. Dat hebben ze gedaan voor drie verschillende typen schepen, elk bij verschillende vaarsnelheden. De resultaten van deze berekeningen hebben we in grafieken uitgezet. Grasman: “Deze grafieken laten precies zien bij welke combinatie van vaarsnelheid, golffrequentie en golfamplitude het schip instabiel wordt.”

Dit mechanische model kan verder verfijnd worden door het schip drie vrijheidsgraden van beweging te geven. Dat wordt gemodelleerd door aan de massa een tweede slinger te verbinden. Deze slinger neemt het effect mee dat de voor- en achterkant van het schip in wekelijkheid ook op en neer bewegen, een schommelbeweging om een horizontale as in dwarsrichting. “Voor dit model hebben we alleen maar een begin van een analyse gemaakt”, zegt Grasman. “Bovendien hebben we de twee slingers onafhankelijk van elkaar verondersteld, iets wat in werkelijkheid niet het geval is. Wiskundig gezien gaat het om een zesde-orde-differentiaalvergelijking, waarbij het de kunst is om in een grote parameterruimte te zoeken naar een resonantie in de rolbeweging. Omdat er van dit systeem nog geen uitgewerkte analyse bestaat, hebben we het MARIN aanbevolen om hier bijvoorbeeld een afstudeerproject van te maken.”

Stochastiek van oceaangolven

In werkelijkheid wordt de toestand van de golven op zee bepaald door de complexe interactie tussen de wind en het oppervlak van de zee. In een tweede aanpak hebben de wiskundigen onderzocht wat het gevolg voor het rolprobleem is wanneer je niet langer golven van één frequentie aanneemt, zoals in de massa-veer-slingermodellen, maar de realistische situatie waarbij het schip een superpositie van golven met allerlei frequenties tegenkomt.

“We hebben twee typen modellen bekeken”, zegt Grasman. “Een model waarbij we de zee stationair veronderstellen, en een tweede model waarin we de zee instationair veronderstellen. Het stationaire model geldt meestal maar een paar uur, tot hoogstens een paar dagen. In het algemeen verandert de golfslag op zee natuurlijk in de tijd. Golven hebben tijd nodig om zich op te bouwen. Beide modellen zijn in de literatuur al uitgebreid bestudeerd en uitgedrukt in een functie die aangeeft hoeveel energie in een golf met een bepaalde frequentie zit: het golfspectrum.”

Deze spectra hebben de wiskundigen gebruikt om een stochastische simulatie maken van de golven. De uitkomst van deze simulatie hebben ze vervolgens als invoer gekozen voor het slinger-veermodel, waarbij het schip twee vrijheidsgraden heeft. Grasman: “Met deze aanpak hebben we laten zien hoe plotseling heftige rolbewegingen kunnen ontstaan. In een voorbeeldsimulatie was er bij een windsnelheid van 8,3 Beaufort nog geen enkele rolbeweging. Maar bij een kleine verhoging van de windsnelheid naar 8,4 Beaufort bleek er binnen tien minuten een heftige rolbeweging te ontstaan. Dit model biedt nog veel ruimte voor verbetering, want wij hadden alleen maar tijd voor het doorrekenen van een vrij eenvoudig voorbeeld. Een van de interessante vragen die je met zo’n stochastisch golfmodel in principe kunt beantwoorden, is de vraag hoelang het duurt voordat de golfamplitude een bepaalde kritische waarde overschrijdt.”

Ontwerpprogramma

“Het is een mooi afgerond stuk werk”, reageert MARIN-onderzoeker Ed van Daalen op de resultaten van de studiegroep. “Door achtereenvolgens analytische modellen met één, twee en drie vrijheidsgraden te beschrijven, kom je steeds een stukje dichter bij de werkelijkheid. De modellen zijn grotendeels gebaseerd op bestaand werk, maar van een deel van de literatuur waren wij niet op de hoogte. Ze geven ons een fris inzicht in het probleem van de hevige rolbewegin-

gen. Het voordeel van deze analytische modellen is dat ze meer inzicht geven dan een computersimulatie waarin je ook alle details van het schip meeneemt. De analytische modellen zijn bovendien geformuleerd in grootheden waar we vertrouwd mee zijn en dat maakt de analyses voor ons gemakkelijk herkenbaar."

Het MARIN heeft nog niet besloten of het met dit werk verder gaat, maar Van Daalen kan zich een aantal wegen voor vervolgonderzoek voorstellen: "We zouden met de inzichten uit het analytische model ons simulatiemodel kunnen verbeteren. Verder kan ik me ook voorstellen dat we een handig rekeninstrument ontwerpen dat voorspelt onder welke condities een schip op zee in de problemen komt. Dat zou een mooi stuk werk voor een toekomstige promovendus kunnen zijn."

Voorbeelden van de gevolgen van de rolbeweging van een containerschip.

Hete zomerdagen voorspellen in een veranderend klimaat

Kun je uit grootschalige atmosferische stromingspatronen voorspellen wanneer Nederland te maken krijgt met extreem warme zomerdagen?

Computermodellen van het klimaat op aarde rekenen op een denkbeeldig rooster dat over de aardbol wordt gespannen. Op dit rekenrooster liggen de rekenpunten typisch tussen honderd en tweehonderd kilometer uit elkaar. Met de bewegingswetten van Newton en de wetten van de thermodynamica worden vervolgens grootheden als temperatuur, druk en windsnelheid in de atmosfeer berekend. Stel, dat je het computermodel laat beginnen met de gemeten waarden van het weer in 1950. Vervolgens laat je de computer vijftig jaar doorrekenen hoe het klimaat zich in die tijd ontwikkelt. Ten slotte kun je dan het klimaatmodel valideren door de uitkomsten van de berekening te vergelijken met de werkelijke gegevens uit de periode 1950-2000.

Als deze validatie goed genoeg blijkt, kun je het computermodel vervolgens gebruiken om het klimaat van bijvoorbeeld de komende vijftig jaar te voorspellen, onder de aanname van een bepaald scenario voor de koolstofdioxide-uitstoot. Een belangrijk probleem is echter dat het rekenrooster te grof is om te voorspellen wat de gevolgen van een veranderend klimaat zijn op elke plek in Nederland. Toch zou je liefst willen weten wat een verandering van grootschalige stromingspatronen voor Nederland betekent, vooral als het gaat om extreem weer. Worden de zomers warmer? Plenst er in de winter meer regen?

Sommige grootschalige atmosferische circulatiepatronen blijken vaak samen op te treden met warme zomerdagen in Nederland, vertelt Frank Selten, onderzoeker bij het KNMI. “Een van deze grootschalige patronen is een hogedrukgebied boven Zuid-Scandinavië. Omdat deze structuur de doorgang van depressies naar het Europese vasteland blokkeert, noemen we dit een ‘blokkerend hoog’. Zo’n blokkerend hoog blijft vaak twee weken bestaan. In deze tijd is het weer in Nederland vrij stabiel. Er is dan minder wind en minder bewolking dan gemiddeld, en er komen vrij veel hete dagen voor. Bij Het KNMI zoeken we naar een objectieve statistische methode om uit grootschalige atmosferische circulatiepatronen te voorspellen wanneer Nederland krijgt te maken met extreme temperaturen, extreme wind of extreme neerslag.”

Het KNMI spitste de vraag aan de Studiegroep Wiskunde met de Industrie toe op extreme temperaturen: Kun je een methode vinden die op grond van de grootschalige luchtcirculatiepatronen kan voorspellen wanneer het in De Bilt een extreem warme zomerdag wordt? “Om dat te onderzoeken,” vertelt Selten, “hebben we de studiegroep de temperatuurmetingen gegeven van 1958 tot 2000 voor elke dag in de zomermaanden juli en augustus. Alle metingen komen van De Bilt. Daarnaast kregen ze de beschikking over de luchtcirculatiegegevens in een gebied dat loopt van Noord-Amerika tot diep in Rusland, en van Noord-Afrika tot de Noordpool. Meer specifiek kregen ze de luchtdrukgegevens op een bepaalde hoogte in de atmosfeer.”

Legendrepolynomen

Over het gegeven geografische gebied ligt een rooster van 49 punten in oost-westrichting en 28 punten in noord-zuidrichting. Dat levert in totaal $28 \times 49 = 1372$ punten waarop de druk bekend is. Een circulatiepatroon wordt dan beschreven in een matrix van 28 rijen bij 49 kolommen.

“Wiskundig gesproken,” zegt Timo Doeswijk van de studiegroep, “zoeken we naar een functie met als invoer het drukpatroon op een bepaalde dag en als uitvoer de maximale temperatuur op die dag.”

Deze functie beeldt een 1372-dimensionale ruimte af op een eendimensionale ruimte. Dit betekent dat het probleem overgedetermineerd is. Er is geen unieke oplossing en de oplossing is gevoelig voor kleine veranderingen in de dataset. Daarom hebben de wiskundigen zich geconcentreerd op datareductie: eerst het aantal vrijheidsgraden op een slimme manier terugbrengen voordat de functie wordt bepaald. Doeswijk: “Het aantal beschikbare roosterpunten is groot en er bestaat ook een grote afhankelijkheid tussen de datapunten. Dit maakt conventionele methoden slecht bruikbaar. Hierdoor hebben we gezocht naar manieren om de luchtdrukgegevens samen te vatten in een aantal hoofdstructuren. Daarvoor hebben we twee wiskundige technieken onderzocht: Legendrepolynomen en een techniek die *watershedding* heet.”

Bij de eerste methode probeerden de wiskundigen om zowel de oneven rijen als de oneven kolommen van de matrix te beschrijven met een vierde-orde Legendrepolynoom. Een vierde-orde Legendrepolynoom wordt in ons geval beschreven met drie parameters. Dat levert (14+25) × 3 = 117 parameters, die moeten worden bepaald. “Dat is nog steeds een fors systeem”, zegt Doeswijk. De wiskundigen namen de lokale temperaturen die tot de vijf procent warmste datapunten behoorden, en vonden 130 datapunten op evenzoveel dagen. De helft van deze temperatuurmetingen, met het bijbehorende drukveld in het gedefinieerde gebied, namen ze om hun model op te stellen. Dat is de kalibratiestap. De andere helft namen ze om te onderzoeken of het model vervolgens ook de extreme temperatuur uit het drukveld kan voorspellen. Dat is de validatiestap.

“Uit de validatie blijkt helaas dat het niet lukt om te zeggen of er een dag met een extreme temperatuur aankomt”, concludeert Doeswijk. “Vervolgens hebben we onderzocht of het resultaat beter zou worden wanneer we het drukveld beschrijven met tweedimensionale polynomen van de zevende of achtste orde, in plaats van met eendimensionale Legendrepolynomen. Dat brengt het aantal parameters terug tot zo’n vijftig. Maar ook deze aanpak leidt niet tot een goede voorspelling van extreem warme dagen.”

Waterkering

De tweede aanpak die de studiegroep onderzocht, is gebaseerd op de *watershed*-techniek (waterkering), een bekende techniek uit de beeldanalyse om alleen de belangrijkste informatie uit een beeld te halen. Het voorbeeld waaruit deze werkwijze afkomstig is, is een topografische toepassing. Een druppel water die boven Amerika valt, eindigt uiteindelijk ofwel in de Atlantische Oceaan ofwel in de Stille Oceaan. De denkbeeldige lijn die deze twee gebieden scheidt, heet de ‘watershed’ ofwel waterkering. In de beeldanalyse wordt het als volgt toegepast: Stel, je begint met een ingewikkeld beeld waarin elk pixel een bepaalde grijswaarde heeft. Je zoekt vervolgens naar een compactere beschrijving van dit beeld door gebieden die qua grijswaarde op elkaar lijken allemaal dezelfde pixelgrijswaarde te geven. Als je de grijswaarden nu denkbeeldig vertaalt naar een bepaalde hoogte, dan stel je het beeld voor als een berglandschappen met pieken van allerlei hoogten en dalen van allerlei diepten.

Vervolgens vul je alle valleien denkbeeldig met water, tot het punt waarop elke vallei helemaal is gevuld. Daar leg je een waterkering neer – een *watershed*. Het getransformeerde beeld bestaat dan nog maar alleen uit de contouren van de waterkering, waarbij elke gesloten contour een gebied met dezelfde grijswaarde omsluit. Dat levert een aanzienlijke reductie van de hoeveelheid beeldinformatie. Alleen de belangrijkste contouren blijven zo zichtbaar.

“Ons idee was om het drukveld ook te zien als een soort berglandschap van pieken en dalen,” zegt Doeswijk, “en met de waterkeringtechniek te zoeken naar de belangrijkste contouren in het drukveld. De vraag was of je op die manier een correlatie kunt vinden met de lokale extreme temperatuur in De Bilt. Helaas hebben we moeten concluderen dat ook dat niet is gelukt. Het is moeilijk te zeggen waar dat aan ligt. Misschien hebben we de informatie uit het drukveld wel te veel gereduceerd. Of misschien moet je er wel meer meteorologische kennis aan toevoegen.”

Grootst gemene deler

Frank Selten van het KNMI vindt de twee aanpakken van de studiegroep origineel, maar geeft eerlijk toe dat ze er waarschijnlijk niets aan hebben. “De studiegroep heeft zich vooral gericht op de beschrijving van de grootschalige structuren, en is eigenlijk niet echt toegekomen aan het leggen van een link met de lokale extreme temperatuur. Zij liepen aan tegen het probleem dat er heel veel informatie zit in de grootschalige structuren, terwijl je alleen maar iets wilt zeggen over een enkel stukje informatie: de temperatuur op één bepaalde plek. Dat ze vastliepen, is geen schande. Het probleem dat wij hebben voorgelegd, is eigenlijk al een heel oud probleem uit de meteorologie. Hoewel er in de loop van de tijd allerlei oplossingsmethoden zijn voorgesteld, bestaat er geen consensus over welke de beste is. Ik denk ook niet dat er één oplossing voor het probleem bestaat.”

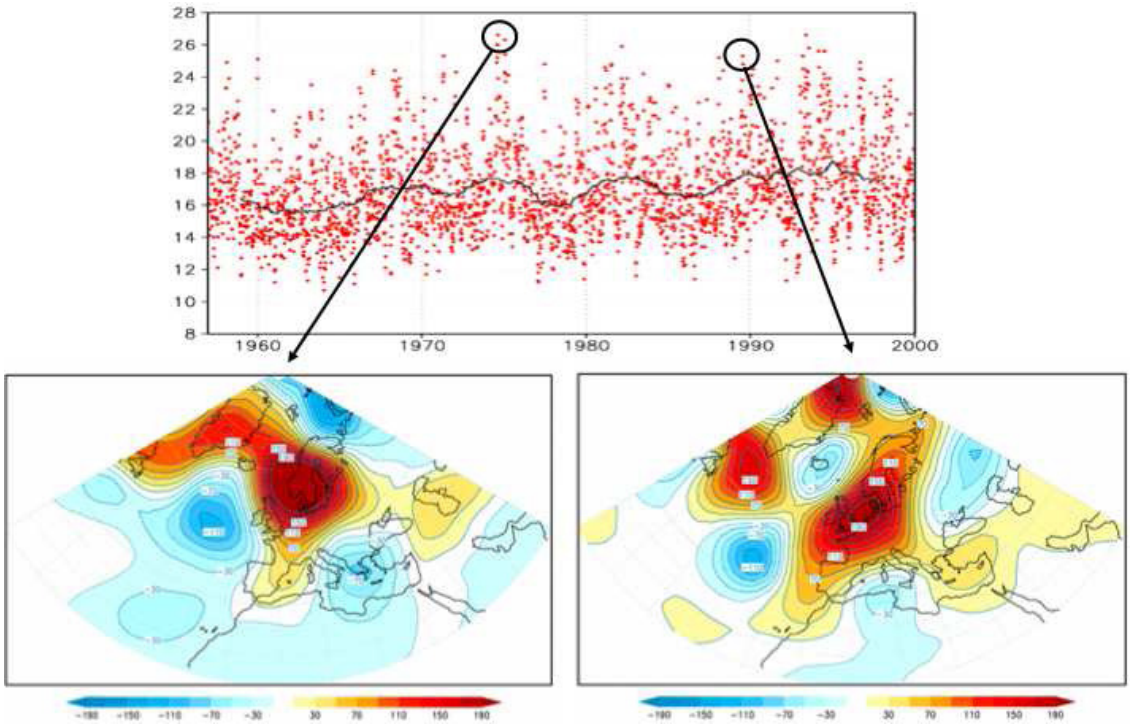
Selten had de hoop dat de wiskundigen ofwel de methode zou bevestigen waaraan het KNMI zelf al had gewerkt, ofwel dat ze zelfs met een betere methode zouden komen. Om de

gedachten van de wiskundigen niet al van tevoren de kant op te sturen van de KNMI-methode, hebben ze deze aanpak dan ook niet voorgelegd. Dat mocht niet baten, want van bevestiging of verbetering bleek geen sprake.

Voorlopig gaat het KNMI daarom verder met de methode die ze zelf al hadden ontwikkeld. “Wiskundig gezien werkt onze methode met een lineaire regressie op een subset van data”, legt Selten uit. “We hebben een grote dataset van temperatuurmetingen over de jaren heen. Daarvan nemen we alleen de tien procent warmste metingen. We hebben laten zien dat we met deze data-subverzameling een goede correlatie vinden tussen de voorspellingen van het model en de gemeten waarden in de zomer. Wat betreft de grootschalige structuren, vinden wij eigenlijk een soort grootst gemene deler: een structuur die redelijk overeenkomt met alle grootschalige structuren die je in de praktijk ziet. Elk grootschalig hogedrukgebied is in de praktijk namelijk weer ietsje anders.”

Met deze methode zal het KNMI uit de klimaatvoorspelling voor de grootschalige atmosferische ontwikkelingen proberen te voorspellen of bepaalde weersextremen in Nederland in de toekomst vaker gaan voorkomen.

Extreme zomerse regenval.



Hoge Nederlandse zomertemperaturen in 1975 en 1990, geassocieerd met grootschalige hogedrukgebieden.

Wiskunde mengt moleculen

Kun je van tevoren uitrekenen hoe goed twee stoffen met elkaar mengen zonder dat de rekentijd uit de hand loopt?

Het van oorsprong Amerikaanse bedrijf Albemarle is een internationaal chemisch concern dat katalysatoren, fijnchemicaliën en additieven voor polymeren produceert. Afnemers zijn onder andere de olieraffinage, de landbouwindustrie, de schoonmaakindustrie en de geneesmiddelenindustrie. Het bedrijf is wereldwijd de grootste producent van de pijnstiller ibuprofen. Hoe chemicaliën mengen is belangrijk voor de verschillende basistechnieken die het bedrijf gebruikt. Daarbij is de vraag steeds om vooraf te voorspellen hoe goed of slecht stoffen met elkaar mengen. De berekeningen dienen ook om die basistechnieken zo goed mogelijk uit te voeren, bijvoorbeeld om medicijnen goed en zuiver uit te laten kristalliseren.

Albemarle gebruikt momenteel modellen die de thermodynamische eigenschappen van een mengsel voorspellen. Ken je de thermodynamica, dan weet je hoe goed stoffen mengen. Natuurkundig gezien wordt het gemak waarmee chemicaliën met elkaar mengen vooral bepaald door de elektrostatische wisselwerking tussen de moleculen in het mengsel. Moleculen hebben een bepaalde verdeling van elektrische lading rond zich en deze verdeling bepaalt wat de moleculen van elkaar voelen en dus hoe goed ze mengen. Door de enorme hoeveelheid moleculen die elkaar allemaal voelen, is het in de praktijk echter ondoenlijk om die wisselwerking exact uit te rekenen. Er zijn benaderingen noodzakelijk.

"Een veel gebruikte benaderingstechniek", legt theoretisch chemicus Jaap Louwen van Albemarle uit, "knipt het oppervlak van een molecuul denkbeeldig in stukjes. Elk stukje krijgt vervolgens een bepaalde positieve of negatieve lading toegewezen of wordt als elektrisch neutraal beschouwd. Bovendien wordt gedaan alsof die oppervlaktestukjes helemaal geen verband met elkaar hebben, iets wat in werkelijkheid wel degelijk het geval is."

Vervolgens worden alle segmenten bij elkaar gegooid en kan een computer met technieken uit de statistische mechanica uitrekenen hoe goed de losse segmenten mengen. In de vloeistof zitten de moleculen dicht op elkaar en meestal zal een segment van het ene molecuul wel een segment van een ander molecuul raken. Segmenten met een gelijke elektrische lading stoten elkaar af en segmenten met een tegengestelde lading trekken elkaar aan. De verzameling van segmenten gaat zich nu volgens de tweede wet van de thermodynamica zodanig rangschikken dat de entropie van het systeem maximaal is. In populaire termen betekent dit dat de wanorde maximaal wordt, gegeven een totale energie. Deze methode, bekend onder de naam COSMO-RS, is ontwikkeld door Andreas Klamt van Bayer en wordt sinds 1995 toegepast.

Het voordeel van COSMO-RS is dat de rekentijd beperkt blijft tot een paar seconden of minuten voor een willekeurig mengsel. Maar het nadeel is dat in deze benadering de geometrie van de moleculen volledig wordt genegeerd. Dat leidt ertoe dat moleculen zich in het model soms anders gedragen dan in werkelijkheid. Louwen: "Onze vraag aan de studiegroep was om te onderzoeken of we de benaderingsmethode realistischer kunnen maken, zonder dat de rekentijd uit de hand gaat lopen."

Lagrange multipliers

Samen met drie andere wiskundigen heeft hoogleraar toegepaste wiskunde Jaap Molenaar van de Universiteit Wageningen tijdens de studieweek aan het probleem gewerkt. Hij vertelt: "Ons uitgangspunt was om de losse segmenten niet meer onafhankelijk van elkaar te beschouwen. We nemen aan dat de wisselwerking tussen twee segmenten van verschillende moleculen afhangt van de ladingsverdeling op naburige segmenten en van de lokale geometrie van het oppervlak van de betrokken moleculen."

De wiskundigen zagen echter al snel dat door het meenemen van de wisselwerking tussen de segmenten geen analytische oplossing meer gevonden kan worden. Molenaar: "Dus hebben we gezocht naar numerieke oplossingen langs twee lijnen. De belangrijkste uitdaging daarbij was om te zorgen dat de rekentijd niet uit de hand loopt. In de eerste aanpak hebben we de methode van COSMO-RS uitgebreid en in de tweede aanpak hebben we het probleem met een simulatietechniek benaderd."

Voor de eerste aanpak gingen de wiskundigen uit van de oorspronkelijke wiskundige formulering voor de entropie van alle moleculen. Dat levert een maximalisatieprobleem onder bepaalde randvoorwaarden. Molenaar: “Een algemene methode om dit probleem op te lossen, maakt gebruik van de zogeheten Lagrange-multiplier-methode. Onze belangrijkste bijdrage was dat we die formulering zodanig hebben herschreven in matrixnotatie dat we het optimalisatieprobleem snel konden oplossen.”

“Ik denk dat we met onze aanpak iets hebben gedaan dat de oude benaderingstheorie essentieel uitbreidt”, zegt Molenaar. “Ik vermoed dat we er zelfs samen met Albemarle over kunnen publiceren. Vooral als het gaat om moeilijke mengsels, kan het bedrijf met onze methode zeker winst boeken ten opzichte van de oude methode. De numerieke oplossing wordt binnen een minuut gevonden. Dat is belangrijk, omdat je daardoor heel veel mogelijke mengsels kunt doorrekenen.”

Simulatie

In de tweede aanpak heeft de studiegroep gekeken hoe de entropie van het systeem kan worden gemaximaliseerd via simulatie. Ook hier geldt dat het onmogelijk is om de interacties tussen alle moleculen uit het mengsel in rekening te brengen. Het vloeibare mengsel wordt opgebouwd gedacht uit een aaneenschakeling van doosjes, die elk genoeg moleculen bevatten om het mengsel op moleculaire schaal realistisch te representeren. Met periodieke randvoorwaarden worden de afzonderlijke doosjes als het ware aan elkaar geplakt om het volledige mengsel te beschrijven. Net als in de eerste aanpak wordt het molecuuloppervlak benaderd door het op te knippen in segmenten, die elk hun eigen lading hebben.

In een enkel doosje worden de beginposities en de beginoriëntaties van alle moleculen willekeurig gekozen. “Via een genetisch optimalisatiealgoritme worden de moleculen verschoven en gedraaid,” legt Molenaar uit, “zodanig dat de entropie stapje voor stapje wordt geoptimaliseerd. Dat probleem lijkt op een soort schuifpuzzel, waarbij je gaat schuiven met blokjes tot je uiteindelijk de gewenste rangschikking met de maximale entropie hebt bereikt.” Een extra complicatie is dat de willekeurig geplaatste moleculen elkaar in de simulatie kunnen overlappen, iets wat in werkelijkheid niet gebeurt. Vandaar dat de functie die geoptimaliseerd wordt niet alleen bestaat uit de entropie maar ook uit een ‘strafterm’ die ervoor zorgt dat de overlap van moleculen minimaal is.

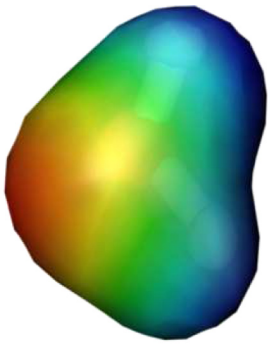
Het simulatieprincipe werkt, maar de cruciale vraag is of er een genetisch algoritme is dat efficiënt genoeg werkt. Liefst moet het binnen een paar minuten een oplossing geven. Daarvoor hebben de wiskundigen voorstellen gedaan, die ze echter nog niet hebben kunnen uitwerken. Dat vereist extra onderzoek en veel programmeerwerk. Wel is eerste aanzet gegeven door een tweedimensionale simulatieaanpak te programmeren.

“Onze conclusie”, aldus Molenaar, “is dat onze eerste methode de oorspronkelijke vraag van Albemarle op een efficiënte manier beantwoordt. De simulatiemethode is echter veel algemener dan onze eerste aanpak, en zou uitgebreid kunnen worden om een mengsel in nog meer detail door te rekenen.”

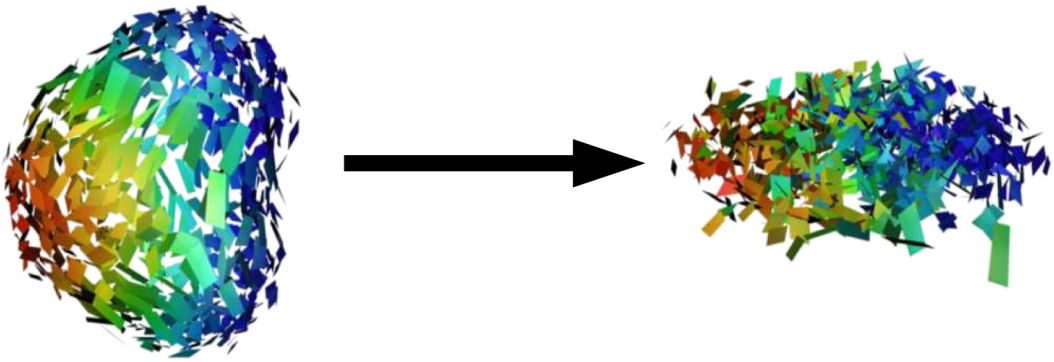
Nieuwe inzichten

“We kunnen de resultaten niet morgen al toepassen,” vertelt Jaap Louwen van Albemarle over de resultaten van de studiegroep, “maar we kunnen er wel degelijk iets mee. Voor ons levert het werk van de wiskundigen een vliegende start voor vervolgonderzoek. In het *Dutch Separation Technology Institute* werken we samen met onder andere DSM, Organon en de universiteiten van Delft en Utrecht aan dit probleem. De bedoeling is dat we in een onderzoeksprogramma van dit instituut enkele promovendi verder laten werken aan allebei de onderzochte onderzoekslijnen van de studiegroep. Die promovendi zullen chemici zijn, die op hun manier natuurlijk wiskundig zijn geschoold, maar toch minder wiskunde in hun bagage hebben dan professionele wiskundigen. In het feit dat professionele wiskundigen met een bredere wiskundige achtergrond naar het mengprobleem kunnen kijken, ligt voor ons precies de toegevoegde waarde.”

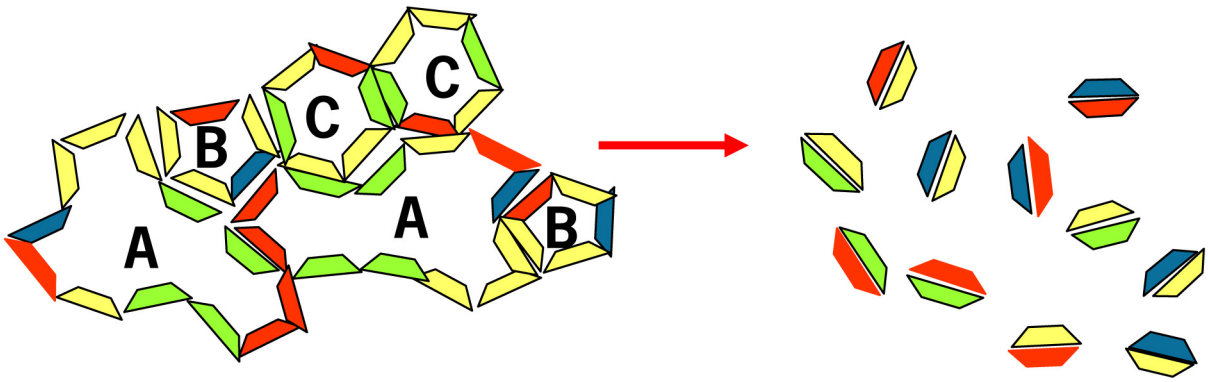
Wat Louwen vooraf had gehoopt, is eigenlijk precies wat eerste aanpak van de studiegroep. “Die aanpak heeft een methode opgeleverd die net zo praktisch werkt als COSMO-RS, maar een hoger realiteitsgehalte heeft. Aan de aanpak van de tweede subgroep hadden we zelf helemaal niet gedacht. Ook dat toont de toegevoegde waarde van de studieweek. Het simulatiewerk geeft een interessante aanzet, maar is voor ons nu nog niet toepasbaar. In grote lijnen is het zeker iets om verder over na te denken, en er zou best wel eens meer uit kunnen rollen.”



Schets van het oppervlak van een watermolecuul met de ladingsverdeling over het oppervlak



In de standaardbenaderingsmethode COSMO-RS, worden de segmenten van een watermolecuul als het ware losgeknipt van het molecuul: het molecuul wordt gemodelleerd als een onafhankelijke verzameling van segmenten.



Elk molecuul wordt opgeknipt in segmenten en het mengsel wordt beschouwd als een gas van onafhankelijke segmenten. De interacties tussen de segmenten worden bij elkaar opgeteld op een gemiddelde manier

.

Opties prijzen met storingsrekening

De formules waarmee banken de prijs van een optie berekenen, zijn lastig zo niet onmogelijk om exact en snel op te lossen. Sinds kort wordt storingsrekening, bekend uit de toegepaste wiskunde en natuurkunde, gebruikt om snel benaderende oplossingen te vinden.

Wie een aandeel van een bedrijf koopt, koopt eigenlijk een klein stukje van dat bedrijf. De koper hoopt dat het de waarde van het bedrijf gaat toenemen, waardoor ook zijn eigen aandeel in waarde gaat stijgen. Zo maakt de koper winst op zijn investering, en hopelijk ook meer dan hetzelfde geld op de bank aan spaarrente zou hebben opgeleverd. Een optie is een iets ingewikkelder financieel product dan een aandeel. Wie een optie koopt, koopt het recht om tegen een vooraf bepaalde prijs, en aan het einde van een vooraf afgesproken periode (variërend van maanden tot jaren), een bepaald aandeel op de financiële markt te kopen (call-optie) of te verkopen (put-optie). Voor dit recht betaalt de optiekoper een bedrag aan degene die het recht verleent.

Stel dat een bepaald aandeel vandaag 40 euro kost en dat je een call-optie koopt die je het recht geeft om over een jaar hetzelfde aandeel voor 45 euro te kopen. Stel, dat de koers over een jaar 50 euro is, dan kun je het aandeel zoals afgesproken voor 45 euro kopen. Als je het dan meteen verkoopt, heb je een winst van 5 euro behaald, minus de kosten voor het kopen van de call-optie. De waarde van de optie *voor* het einde van de looptijd hangt dus af van de verwachte ontwikkeling van de aandelenprijs.

Banken zoeken naar rekentechnieken om optieprijzen te berekenen. De verwachte ontwikkeling van de aandelenprijs hangt zelf weer op een stochastische wijze af van drie belangrijke parameters: de huidige prijs van het aandeel, de rente en de volatiliteit, ofwel de beweeglijkheid van een bepaald aandeel. Hoe meer de waarde van een aandeel in de loop van de tijd schommelt, hoe groter de volatiliteit. En hoe groter de volatiliteit, hoe groter het risico van een investering in dat aandeel. Stabiele beursfondsen hebben een vrij lage volatiliteit. Instabiele beursfondsen hebben een hoge volatiliteit. De optieprijs is verder ook nog afhankelijk van de rente. Immers: hoe hoger de rente, hoe aantrekkelijker het is om je geld om een spaarrekening te zetten in plaats van te beleggen in aandelen of opties.

Zowel de ontwikkeling van de rentestand als die van de volatiliteit is niet van tevoren bekend, en moeten dus geschat worden. In de afgelopen decennia zijn oplossingen gevonden voor verschillende eenvoudigere versies van het oorspronkelijke probleem om de waarde van opties te berekenen. In het veel toegepaste Black-Scholes model uit 1973, worden zowel de rente als de volatiliteit constant in de tijd verondersteld. Dat heeft als grote voordeel dat de optieprijs uitgedrukt kan worden in een formule die snel en relatief eenvoudig kan worden opgelost. Het realistischere Heston-model uit 1993 gaat een stap verder dan het Black-Scholesmodel door aan te nemen dat de volatiliteit willekeurig in de tijd varieert. De rentestand wordt wel nog steeds constant verondersteld.

Hybride model

"De volgende logische stap is om ook de rente te laten variëren", vertelt wiskundige Lech Grzelak. Grzelak is bezig aan een promotieonderzoek in de financiële wiskunde. Vier dagen per week werkt hij bij de Rabobank, die zijn promotieonderzoek financieren, en een dag per week bij de TU Delft. "De waarde van een optie wordt dan afhankelijk van drie stochastische processen, namelijk die voor het aandeel, de volatiliteit en de rente", vertelt Grzelak. "Een extra complicatie is dat de rente en de volatiliteit van elkaar afhankelijk zijn. Zo'n model heet een hybride model."

Sinds een aantal jaren wordt storingsrekening gebruikt in de financiële wiskunde om problemen op te lossen die met andere methoden te moeilijk te kraken zijn. Storingsrekening, of *perturbation method* in het Engels, wordt veel toegepast in de natuurkunde en de scheikunde. Deze methode wordt gebruikt om benaderende oplossingen te vinden van differentiaalvergelijkingen. Zo'n benaderende oplossing wordt wiskundig opgeschreven als een som van opeenvolgende termen, waarbij elke volgende term minder belangrijk is dan de vorige. De eerste term is de oplossing van een eenvoudiger probleem, dat wel een exacte oplossing heeft. De volgende

termen worden uitgedrukt in een of meer kleine parameters, die in het gegeven probleem een belangrijke rol spelen. Hoe gedetailleerder je de oplossing wilt weten, hoe meer termen je moet meenemen en hoe langer de berekening duurt.

"Onze vraag aan de studiegroep was om te onderzoeken of storingsrekening gebruikt kan worden om een hybride model voor optieprijzen op te lossen", zegt Grzelak.

Limietgevallen

Wiskundige Martin van der Schans van de Universiteit Leiden werkte samen met vier collega's aan het Rabobank-probleem. "We realiseerden ons dat het om een veel bestudeerd probleem gaat dat we onmogelijk in een week konden oplossen. We moesten dus zorgen dat we niet te veel hooi op onze vork zouden nemen."

De wiskundigen bestudeerden eerst het werk van een andere groep wiskundigen, die in 2007 tijdens de Studieweek Wiskunde met de Industrie in opdracht van ING een oplossing hadden gezocht van het Heston-model. "Dat is een eenvoudiger probleem," aldus Van der Schans, "omdat van de drie stochastische processen – aandeelprijs, volatiliteit en rente – alleen de afhankelijkheid tussen aandeelprijs en volatiliteit wordt meegenomen. De andere twee van de drie correlaties veronderstel je 0. In ons hybride model nemen we twee van de drie correlaties mee, die tussen aandeel en volatiliteit en die tussen rente en volatiliteit."

De wiskundigen vonden vervolgens in de wetenschappelijke literatuur verschillende manieren om dit hybride probleem aan te pakken. Uiteindelijk vonden ze een aanknopingspunt in een model dat het gedrag van de volatiliteit splitst in een langzaam en een snel proces. Van der Schans: "Het model dat wij wilden oplossen, leek op hun model. Deels konden we hun resultaten gebruiken, en deels hebben we daar onze eigen aanpak aan toegevoegd. De drie gekoppelde vergelijkingen voor de aandeelprijs, de volatiliteit en de rente konden we formuleren als een partiële differentiaalvergelijking, waarin twee kleine parameters voorkomen: ε en δ."

De optieprijs kan dan worden uitgedrukt als een som van termen. De eerste term is de exact bekende oplossing van de Black-Scholes-vergelijking. De tweede term wordt uitgedrukt in de kleine parameter δ en de oplossing van het in de literatuur gevonden model. De derde term wordt uitgedrukt in de kleine parameter ε en een term die de wiskundigen zelf moesten uitrekenen.

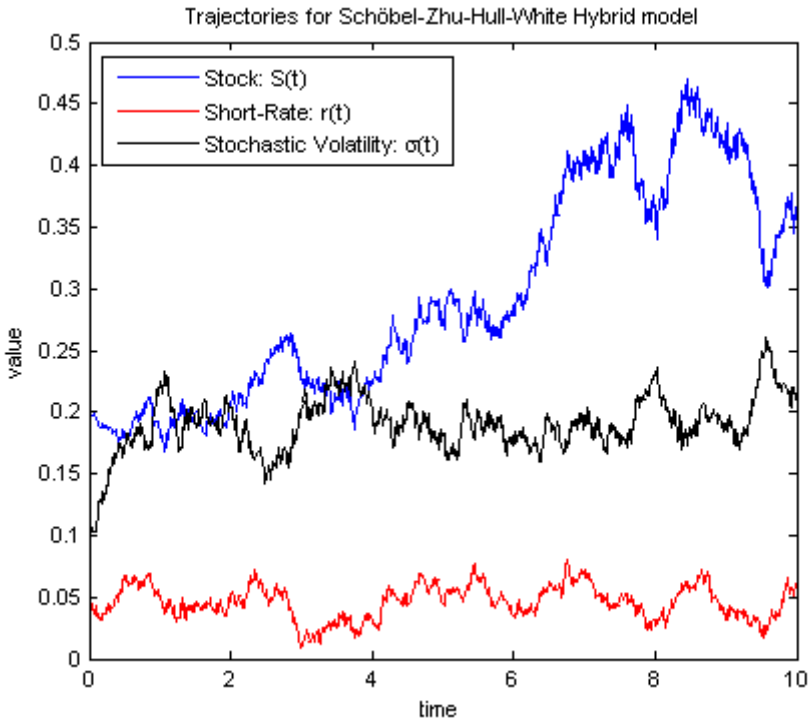
"Om die termen uit te rekenen", vertelt Van der Schans, "hebben we de limietgevallen bekeken waarin of ε of δ naar 0 gaan. Elk van die limietgevallen levert een partiële differentiaalvergelijking waarvoor we de algemene oplossing hebben bepaald. In de praktijk zal de bank die oplossingen numeriek moeten uitrekenen. Maar onze cruciale toevoeging is, dat we de formules die wij hebben afgeleid sneller kunnen oplossen dan wanneer we zouden proberen de oorspronkelijke partiële differentiaalvergelijking numeriek op te lossen. De winst van het gebruiken van verstoringstheorie zit dus in de snelheid waarmee je een vrij goede, maar benaderende oplossing vindt."

Hiermee heeft de studiegroep een eerste stap gedaan in het toepassen van verstoringstheorie op het hybride model. "Maar er moet nog wel wat extra werk worden gedaan wil Rabobank deze aanpak kunnen toepassen", zegt Van der Schans. "Zo moet de benaderende oplossing worden gekalibreerd aan de marktdata. Stel dat de benadering niet nauwkeurig genoeg blijkt te zijn, dan is het nodig om hogere orde termen te berekenen."

Nieuwe wegen

"We gaan met de resultaten van de studiegroep verder", geeft Lech Grzelak van Rabobank als commentaar op het werk van de studiegroep. "Wij hebben bij de bank geen experts op het terrein van storingsrekening, en dat was ook een belangrijke reden om het hybride model voor te leggen aan de studiegroep, met de vraag om het met storingsrekening aan te pakken. Onderzoekers proberen dit soort problemen uit de financiële wiskunde met steeds andere technieken op te lossen, om te kijken welke in de praktijk het beste werkt. En verstorings-theorie is een relatief nieuwe techniek waarmee het probleem kan worden benaderd. Om die reden hebben een aantal mensen van Rabobank in 2008 een cursus storingsrekening aan de TU Delft gevolgd. De Studieweek Wiskunde met de Industrie zien we als een vervolgstap daarop."
"Wij wisten ook wel dat een week onvoldoende is om het hele probleem op te lossen, maar de

wiskundigen hebben ons een aantal nieuwe wegen laten zien die we zelf verder gaan bewandelen. En dat zijn wegen die nog maar door weinig anderen worden verkend, zo hebben we gezien. Ook hebben ze ons op een aantal interessante eerdere studies uit de literatuur gewezen, die we ook verder gaan bestuderen."



Tijdafhankelijkheid van het aandeel, de rente en de volatiliteit.

Wiskundige kijk op het droogproces van milieuvriendelijke verven

Van het droogproces van milieuvriendelijke, waterdragende verfsoorten is veel minder bekend dan van die van de traditionele verfsoorten. DSM zoekt daarom naar een wiskundige beschrijving van het droogproces van waterdragende verven, die het bedrijf gemakkelijk met eigen experimenten kan vergelijken.

Het is de verf die kleur geeft aan onze huizen, kantoorgebouwen, auto's en vliegtuigen. Maar de verf moet niet alleen de gewenste kleur hebben, hij moet ook de juiste mechanische eigenschappen hebben en snel drogen na het aanbrengen. Vroeger werden vooral verven op basis van organische oplosmiddelen gebruikt, juist omdat deze zo snel drogen. Helaas zijn organische oplosmiddelen schadelijk voor zowel het milieu als voor de schilder. Daarom worden de traditionele verfsoorten hoe langer hoe meer vervangen door waterdragende verven. Die hebben echter weer een ander nadeel: ze drogen langzamer dan de verven gebaseerd op organische oplosmiddelen.

Waterdragende verven bestaan uit een waterige omgeving gevuld met polymeerbolletjes in de orde van zo'n éénduizendste millimeter (ook wel bekend als latexverf). Na het uitstrijken van de verf verdampt het water uit de verflaag. De concentratie polymeerbolletjes neemt daardoor voortdurend toe, totdat vrijwel al het water uit de verf is verdwenen. De bolletjes zitten dan zo dicht tegen elkaar aan dat de polymeermoleculen van de afzonderlijke bolletjes van het ene naar het andere bolletje oversteken en de bolletjes met elkaar laten versmelten. Zo ontwikkelt zich een sterke en droge homogene verflaag.

De verfmarkt is een van de vele markten waarop chemieconcern DSM zich begeeft. Soms maakt en verkoopt DSM de verf helemaal zelf. Soms ontwikkelt en verkoopt het alleen het recept voor de verf met het benodigde polymeermateriaal. Daarmee kan een klant vervolgens zelf de verf maken. DSM verkoopt de verven en verfrecepten vooral aan zakelijke klanten, die er op hun beurt verven voor auto's, vliegtuigen en boten mee maken, maar ook verven voor huis-, tuin- en keukengebruik.

"Het droogproces van watergebaseerde verven is nog onvoldoende bestudeerd", vertelt Han Slot van DSM. "Wij hadden de behoefte aan alternatieve wiskundige modellen voor het droogproces, die ons een nieuwe kijk zouden geven. Dat is de reden dat we het probleem hebben voorgelegd aan de Studiegroep Wiskunde met de Industrie."

Eéndimensionaal model

De studiegroep bestudeerde twee verschillende typen modellen. Het eerste is een eendimensionaal macroscopisch model dat de verdamping van het water uit de verflaag beschrijft. Het tweede is een microscopisch model dat het gedrag van een groot aantal polymeerbolletjes in een waterige omgeving simuleert.

Joost van Opheusden van de Wageningen Universiteit was een van de zes wiskundigen die tijdens de studieweek aan het DSM-probleem heeft gewerkt. "We hebben het eendimensionale probleem eigenlijk in twee stappen bestudeerd", vertelt hij. "De eerste stap beschrijft hoe de dikte van de verflaag in de tijd afneemt. Deze stap zegt alleen iets over het droogproces, maar nog niets over het ontstaan van de mechanische eigenschappen van de verf. Daarom hebben we in een tweede stap specifiek gekeken naar het samenklonteren van de polymeerbolletjes. Deze stap geeft een eerste aanzet voor het beschrijven van de toenemende stijfheid van de drogende verf."

De wiskundigen hebben de eerste stap uitgedrukt als een diffusieproces voor de waterfase, waarbij het water aan de bovenkant van de verflaag langzaam verdampt. Deze modellering levert een stelsel vergelijkingen voor de volumefractie van water als functie van de tijd. Aan de onderzijde ligt de rand vast, maar aan de bovenkant van de drogende verflaag verandert de rand steeds van positie, wat de oplossing van het stelsel vergelijkingen bemoeilijkt. Deze eerste stap houdt in het geheel nog geen rekening met de details van de polymeerfase.

In de tweede stap hebben de wiskundigen het model uitgebreid door het effect mee te nemen dat polymeerbolletjes aan elkaar gaan plakken en clusters vormen. "We nemen nu niet langer een enkele volumefractie voor de polymeerdeeltjes aan", legt Van Opheusden uit, "maar

een serie van volumefracties, elk voor een bepaalde clustergrootte: een cluster van 2, 3, 4 enzovoort deeltjes bij elkaar. Daarmee leiden we een reactie-diffusievergelijking af voor een cluster met een bepaald aantal deeltjes als functie van de hoogte in de eendimensionale verflaag en als functie van de tijd. Het reactiegedeelte wordt bepaald door de kans dat verschillende aantallen deeltjes aan elkaar plakken. Met dit model hebben we een vergelijking afgeleid voor de stijfheid van de verflaag als functie van de tijd."

Zowel de eerste als de tweede stap van het eendimensionale model hebben de wiskundigen numeriek opgelost met een implementatie in het bekende programma MATLAB. De resultaten geven vooral een kwalitatief idee van het droogproces en het klonterproces van de deeltjes. Van Opheusden: "Voor een vergelijking met experimentele resultaten moet je de modellen eerst voeden met kwantitatieve gegevens over het diffusieproces en het coagulatieproces. Die gegevens zou DSM er vrij eenvoudig zelf in kunnen stoppen."

Deeltjessimulatie

Het tweede model voor de drogende verflaag kiest een heel andere aanpak. Zowel de waterfase als de polymeerfase wordt beschreven als een verzameling deeltjes die door thermische fluctuaties door elkaar bewegen. De waterdeeltjes stoten elkaar af, en de polymeerdeeltjes trekken elkaar aan. Wanneer de polymeerdeeltjes dicht genoeg bij elkaar komen, plakken ze aan elkaar. Het systeem van deeltjes wordt vervolgens op de computer gesimuleerd met een standaard Brownse Dynamica-aanpak. Van elk deeltje wordt uitgerekend waar het zich op welk moment bevindt.

"Om een gevoel te krijgen of deze simulatieaanpak werkt", vertelt Van Opheusden, "zijn we begonnen met driehonderd bolletjes: tweehonderd polymeerbolletjes en honderd waterbolletjes. We hebben de bolletjes aan het begin van de simulatie op willekeurige posities neergezet. De waterbolletjes kunnen tijdens de simulatie aan de bovenkant ontsnappen, de polymeerbolletjes niet. De krachten tussen de bolletjes hebben we eigenlijk met de natte vinger gemodelleerd, omdat we daar geen experimentele informatie over hadden. Maar ik kan me voorstellen dat je die in de praktijk kunt meten met een atomaire-krachtmicroscoop. Om een eerste indruk te krijgen van hoe de simulatie werkt, hadden we die experimentele informatie niet nodig."

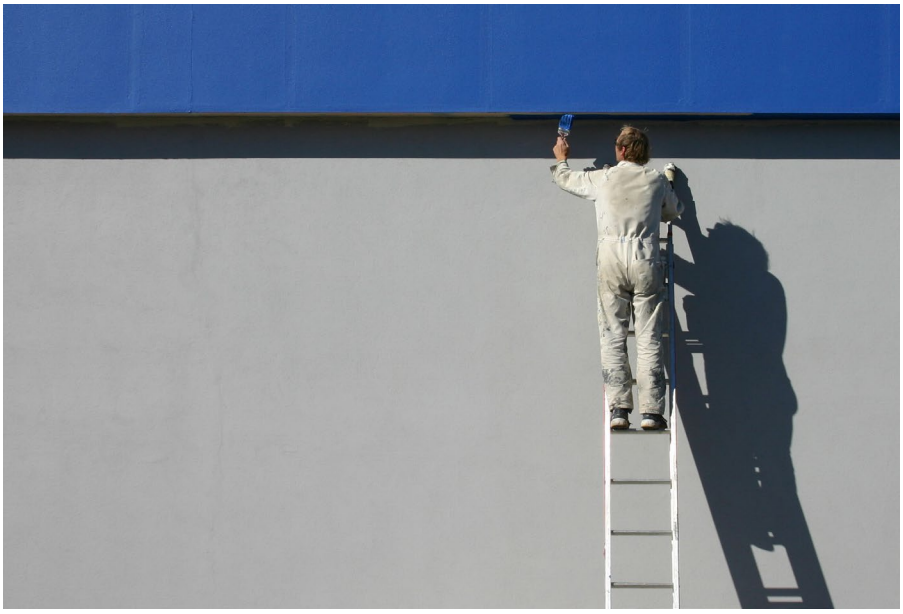
De simulatieresultaten laten zien dat er in het begin veel kleine deeltjesclusters zijn die relatief snel bewegen. Langzaam gaan zich vervolgens grotere clusters vormen die langzamer gaan bewegen. Dan gaan zich steeds sneller grotere clusters vormen, totdat na een tijdje een maximale clustergrootte is bereikt. "Het mooie van de simulatieaanpak", zegt Van Opheusden, "is dat je de stijfheid van de verflaag zonder extra aannames kunt uitrekenen uit het microscopische gedrag van alle bolletjes. Je hoeft alleen maar de krachten op alle bolletjes te sommeren."

Experimentele toetsing

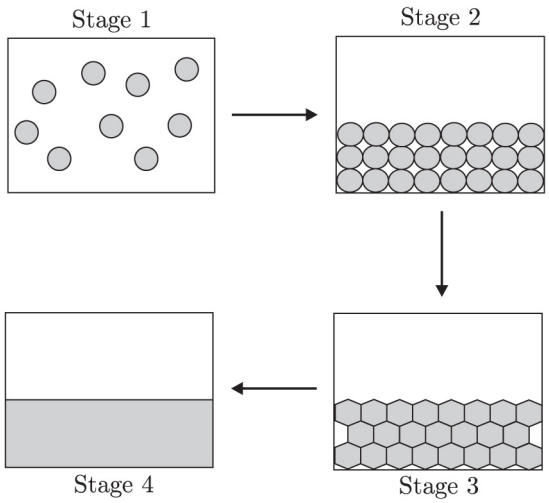
"Wij hebben een sterke voorkeur voor de eerste aanpak: het analytische model", reageert Han Slot van DSM op de resultaten van de studiegroep. "De computersimulatie heeft wel potentieel, maar we weten nog niet of we daar mee verder gaan. Voor ons is belangrijk dat we een theoretische beschrijving van de verf zo goed mogelijk kunnen toetsen aan de experimenten die wij uitvoeren. Computermodellen geven weliswaar heel gedetailleerde informatie over de netwerkvorming van de polymeerdeeltjes, maar in onze experimenten kunnen we die deeltjes toch niet volgen, en dus kunnen we het model dan niet goed toetsen. De computermodellen geven juist geen directe informatie over het droogproces, dat we experimenteel wel goed kunnen toetsen. In onze experimenten krijgen we alleen macroscopische informatie, bijvoorbeeld over hoe de afschuifspanning van de drogende verf in de tijd verandert. Deze informatie kunnen we wel direct koppelen aan het analytische model, maar niet aan de computersimulaties."

Slot denkt dat DSM verder gaat met de eerste, analytische aanpak van de studiegroep. "De analytische resultaten zijn eigenlijk precies waar we vooraf op hadden gehoopt. Op dit moment hebben we er in concrete zin nog niets aan, maar de resultaten van de studiegroep laten wel de juiste trends zien. Dat betekent dat ze een goed startpunt kunnen vormen voor verder onderzoek. Misschien dat we in de toekomst de computersimulaties wel kunnen gebrui-

ken om onderdelen van het analytische model nauwkeuriger te modelleren. Dan vertaal je gedetailleerde microscopische informatie naar een meso- of zelfs macroscopisch niveau. Daarvoor moet dan wel eerst wat meer fysica in de computersimulatie worden gestopt."



Schilder aan het werk



Schematische weergave van het drogen van een verflaag.

Software optimaliseert pompstrategie drinkwater

Hoe kan een drinkwaterbedrijf de kosten van haar elektrische pompen zo laag mogelijk houden als de elektriciteitsprijs gedurende een etmaal varieert?

Het Nederlandse ingenieursbureau DHV ontwikkelde ruim tien jaar geleden het softwarepakket OPIR: *Optimale Productie door Intelligente Regeling*. OPIR regelt de pompstrategie voor de drinkwatervoorziening in een bepaald gebied. Drinkwater wordt via een systeem van elektrische pompen bij centrale pompstations naar de afnemers geleid. De elektriciteitsprijs varieert echter gedurende een etmaal, in sommige landen meer dan in andere. Een drinkwaterbedrijf vraagt zich daarom af hoe het de pompen zo kostenefficiënt mogelijk kan bedienen, terwijl ze tegelijkertijd in de drinkwaterbehoefte van het gebied voorzien. Wanneer kunnen de pompen het beste aan staan om de waterreservoirs bij te vullen? En wanneer kunnen ze het beste uit staan, zodat de reservoirs langzaam leeglopen?

Zo'n vijf miljoen Nederlanders krijgen hun drinkwater via een pompregeling die wordt geregeld door dit softwarepakket. Een Canadees dochterbedrijf van DHV heeft het softwarepakket verkocht aan de Grimsby-regio in Canada, dat iets ten westen van de Niagara Watervallen ligt, dichtbij de grens met de Verenigde Staten. Waar in Nederland de elektriciteitsprijs alleen maar verschilt tussen dag en nacht, varieert de elektriciteitsprijs in de Grimsby-regio veel dynamischer dan in Nederland. Dat maakt het voor een drinkwaterbedrijf moeilijker om de beste pompstrategie uit te rekenen.

Ingenieur Olivier Hartel van DHV is medeontwikkelaar van het softwarepakket. Hij vertelt over de Grimsby-regio: "De software stuurt hier vijftien pompen aan die drie stadjes van drinkwater voorzien: Smithville, Beamsville en Grimsby. Die liggen alle drie op een andere hoogte. Voor elke dag van het jaar is een gemiddeld drinkwaterverbruik voor elk stadje bekend. Verder kan elke pomp ieder kwartier aan- of uitgeschakeld worden. Ons Canadese dochterbedrijf heeft bij ons aangeklopt met de vraag of het drinkwaterbedrijf verder kan besparen op de kosten door een slimmere pompstrategie te kiezen. Die zouden wij dan in de software moeten implementeren."

Het liefst zou DHV het softwarepakket 48 uur van tevoren de beste pompstrategie laten berekenen. Dat levert echter $2^{(4 \times 48 \times 15)}$ schakelmogelijkheden op: een getal met meer dan achthonderd nullen. Dat zijn veel te veel mogelijkheden om ze allemaal door te rekenen en de beste uit te kiezen. In de huidige software kunnen operators bij een pompstation instellen wanneer de waterreservoirs minder vullen, of zelfs leeglopen, tijdens de uren waarin de elektriciteitsprijs hoog is, en meer vullen tijdens de goedkope periode. De operators doen dat op grond van hun ervaring. Maar dat is een ad-hocoplossing, die waarschijnlijk niet de optimale pompstrategie levert.

"Onze vraag aan de Studiegroep Wiskunde met de Industrie," vertelt Hartel, "was om te onderzoeken wat dan wel de optimale pompstrategie is. Daarbij moeten de kosten van het elektriciteitsverbruik minimaal zijn, onder de aanname dat de mensen genoeg water krijgen, en dat de waterreservoirs te allen tijde minimaal voor 75% gevuld zijn en maximaal voor 95%. Verder is de pompcapaciteit voor elke pomp gegeven. Dat geeft de fysieke beperking van het systeem."

Eén pompstation

"Wiskundig gezien gaat het om een dynamisch optimalisatieprobleem", zegt universitair hoofddocent meet-, regel- en systeemtechniek Karel Keesman van de Wageningen Universiteit. Hij maakte deel uit van een groep van zes wiskundigen die zich een week lang over het DHV-probleem heeft gebogen. "We hebben eerst een analytische oplossing bepaald voor een vereenvoudigde versie van het optimalisatieprobleem. Vervolgens hebben we een numerieke oplossing bepaald voor een realistischere versie."

De Grimsby-regio kent vier pompstations (met twee, drie, vier en zes pompen) en drie waterreservoirs. Om een analytische oplossing voor de optimale pompstrategie te berekenen, beperkte de studiegroep het probleem tot één pompstation, één waterreservoir en de vraagcurve van één stadje naar drinkwater. Bovendien werd verondersteld dat de pompen continu kun-

nen schakelen naar elk gewenst debiet. Keesman: “Dan heb je het oorspronkelijke probleem genoeg uitgekleed om een analytische oplossing te vinden. Als je het probleem voor één pompstation hebt opgelost, kun je daarna hetzelfde voor de andere drie doen.”

Het probleem voor één pompstation heeft de studiegroep geformuleerd als een Lagrangiaans probleem. Hierin wordt een functie voor het energieverbruik van dit ene pompstation geformuleerd. Dat levert een integraal over een tijdsperiode van twee etmalen. Deze energiefunctie moet worden geminimaliseerd onder de door DHV gegeven randvoorwaarden voor het schakelen van de pompen, de vulgraad van de reservoirs en de pompcapaciteiten. “Maar,” zegt Keesman, “we hebben de randvoorwaarde van de vulgraad van de reservoirs moeten loslaten om een analytische oplossing te vinden.”

Het grote voordeel van de analytische oplossing is, dat hij meteen inzicht geeft in de manier waarop de pompstrategie afhangt van de elektriciteitsprijs. Tussen middernacht en zeven uur in de ochtend, is het waterverbruik het laagste en zijn ook de energiekosten het laagste. De analytische oplossing laat zien dat het pompstation zijn pompen in deze periode vol aan moet zetten om het waterreservoir te vullen. Tussen zeven uur ’s ochtends en negen uur ’s avonds zijn de energiekosten hoger. En hoewel ze ook in deze periode enigszins in de tijd varieren, laat de analytische oplossing zien dat dit de tijdsperiode is waarin de pompen het beste uit kunnen staan. En dus loopt het waterreservoir in deze periode weer geleidelijk leeg. Later in de avond gaan de pompen weer aan en wordt het reservoir langzaam bijgevuld.

Algemeen recept

Voor een meer realistische situatie, waarin alle vier de pompstations van de Grimsby-regio worden gemodelleerd, en ook de drinkwaterbehoefte voor de drie stadjes, is een numerieke aanpak nodig. Hierin namen de wiskundigen ook de randvoorwaarde mee die de vulgraad van de reservoirs voorschrijft. De vraag op welk moment welk pompstation aan- of uit wordt geschakeld, wordt in de analyse in eerste instantie niet meegenomen. Het idee is dat aan de hand van de numerieke oplossingen achteraf wordt bekeken welke pompen precies op welk tijdstip aan of uit moeten staan om de berekende optimale strategie te realiseren.

“We hebben dit probleem in Matlab geprogrammeerd”, zegt Keesman. “Daarin kunnen we de randvoorwaarden handig meenemen. Voor alle vier de pompstations hebben we uitgerekend hoeveel water ze als functie van de tijd moeten verpompen in een etmaal. Dat zijn de pompdebieten. Globaal gesproken hebben die eenzelfde vorm als in de analytische oplossing. In de details zitten echter verschillen. We zien dat in de numerieke oplossing het maximale pompdebiet in de nacht langer doorloopt. In de analytische oplossing staan de pompen tot zeven uur vol aan, en in de numerieke oplossing tot negen uur. Verder zien we in de numerieke oplossing de energieprijs op een wat ingewikkelder manier terugkeren in het pompgedrag. De grafieken die het pompgedrag als functie van de tijd weergeven, worden iets ingewikkelder dan bij de analytische oplossing.”

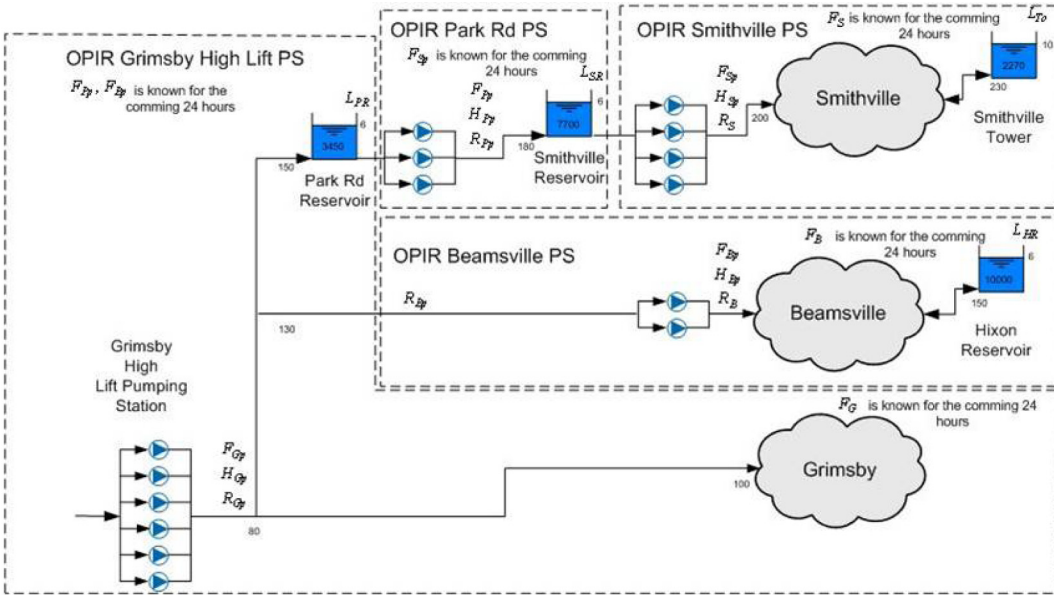
Ten slotte hebben de wiskundigen onderzocht hoe de uitgerekende pompdebieten in de praktijk gerealiseerd moeten worden. De vraag is dan om te bepalen welke van de vijftien pompen op elk kwartier aan of uit moeten staan. “Hiervoor hebben we op basis van netwerktheorie een methode voor een oplossing geschetst”, zegt Keesman. “We hadden niet genoeg tijd om deze methode voor een praktijkgeval uit te werken. Wel hebben we nog een recept geformuleerd voor hoe je een algemener model, met meer steden en meer pompen, kunt oplossen. Ik denk dat de uitkomst van het numerieke model en het recept voor een algemene oplossing voor DHV het meest interessant is. Beide gaan een stap verder dan wat DHV zelf al aan dit probleem had gedaan.”

Extra module

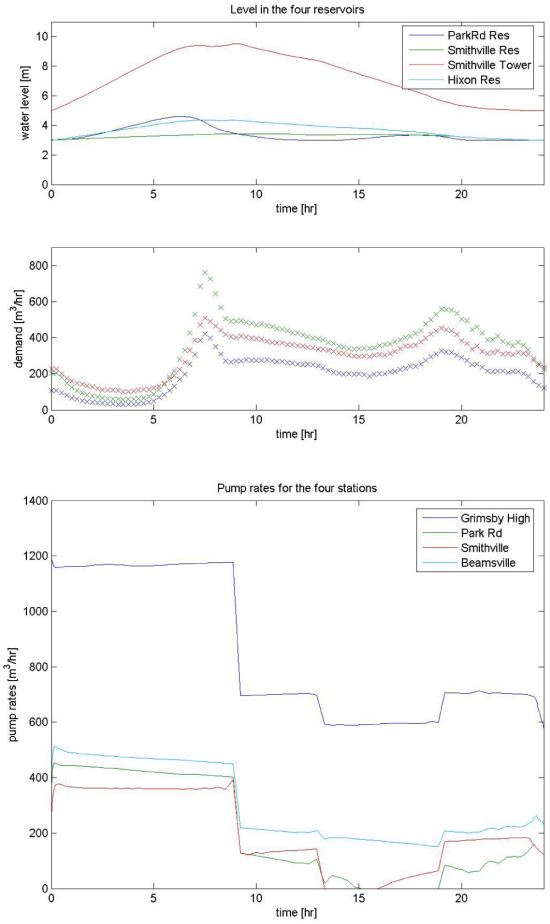
Olivier Hartel van DHV vindt dat de studiegroep een aantal goede aanwijzingen heeft gegeven om de software aan te passen. De kans is daardoor groot dat het bedrijf tegemoet kan komen aan de vraag van de Grimsby-regio. “De studiegroep heeft aangegeven dat je voor het gehele systeem één enkele optimalisatie kunt berekenen”, zegt Hartel. “De algoritmes die we daarvoor moeten gebruiken, kunnen we ook implementeren in onze software. Dat is voor ons natuurlijk belangrijk. Met één praktische software-eis heeft de studiegroep echter nog geen rekening ge-

houden. Ons softwarepakket bestaat uit losse modules. Elke module stuurt een subgebied van de drinkwatervoorziening aan, en kijkt met een schuin oog naar wat er in andere subgebieden gebeurt. In principe willen we dat elke module de optimale oplossing voor zijn eigen subgebied berekent. Omdat het softwarepakket al jarenlang een beproefd product is, willen we de structuur ervan niet in een keer omgooien."

De volgende vraag is dan hoe dicht de combinatie van die optimale oplossingen voor de subgebieden ligt bij de optimale oplossing voor het gebied als geheel. "Dat is een moeilijk probleem, waarvan we wel wisten dat het niet in een week valt op te lossen", zegt Hartel. "We gaan nu eerst één afstudeerstudent verder aan dat probleem laten werken, en als vervolg daarop nog een tweede. Idealiter willen we zo lang mogelijk van tevoren bepalen wat de optimale pompstrategie is. Dat is waarvoor klanten onze software kopen."



Schema van de drinkwatervoorziening in de Grimsgy-regio in Canada, met de pompstations en de reservoirs die de drie stadjes Smithville, Beamsville en Grimsby van drinkwater voorzien.



Numerieke resultaten:
Boven: de waterniveaus in de vier reservoirs als functie van het uur van de dag
Midden: de vraagcurves voor de drie stadjes naar drinkwater als functie van het uur van de dag
Onder: de gevonden numerieke oplossingen voor de pompdebieten voor de vier pompstations, als functie van het uur van de dag

Verslagen van de Studiegroep Wiskunde met de Industrie 2009

Wageningen, 2009

Bennie Mols

Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek