

# Computational Science & Engineering

## Keuzevakken voor niet-wiskundigen

**A**ls je in je bachelorfase een numeriek vak hebt gevolgd dan heb je ontdekt dat zelfs een eenvoudig probleem niet altijd snel en efficiënt opgelost kan worden. Bovendien spelen de afrondfouten die een computer nu eenmaal maakt een grote rol, zodat bij een naïeve aanpak het resultaat waardeloos kan zijn.

Deze eerste kennismaking, hoe belangrijk en nuttig ook, is niet echt voldoende als je ingewikkelde problemen numeriek wilt gaan oplossen. Vroeg of laat wordt van vrijwel iedere ingenieur gevraagd numerieke simulaties te produceren. In feite is dit laatste zo belangrijk geworden dat wetenschap en techniek niet meer zonder deze numerieke berekeningen kunnen. Dit heeft geleid tot een aparte manier van wetenschapsbeoefening: *computational science* (naast experiment en theorie).

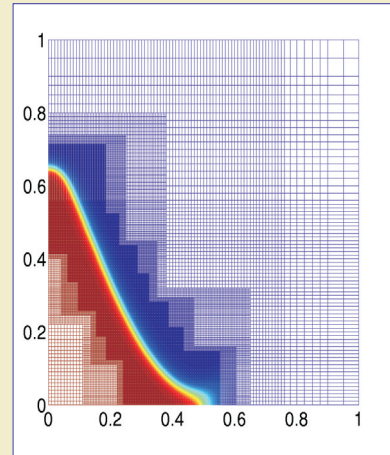
Natuurlijk is er veel software beschikbaar voor allerlei soorten problemen. Echter alleen al het gebruik hiervan vereist een redelijke kennis van de methoden die hieraan ten grondslag liggen. Heel vaak blijkt bovendien dat voor het probleem dat je moet oplossen geen standaardsoftware geschikt is. Dan moet je alsnog zelf aan de slag, op zijn minst om bestaande software uit te breiden of geschikt te maken. Juist ook voor niet-wiskundigen wordt er daarom een drietal cursussen aangeboden waar de belangrijkste numerieke methoden aan de orde komen die je bij simulatie van technische problemen tegenkomt. Deze zijn:

- 2WN00 *Scientific Computing in Linear Algebra*
- 2WN02 *Scientific Computing in Partial Differential Equations*
- 2WN03 *Finite Element Methods*

### 2WN00 Scientific Computing in Linear Algebra

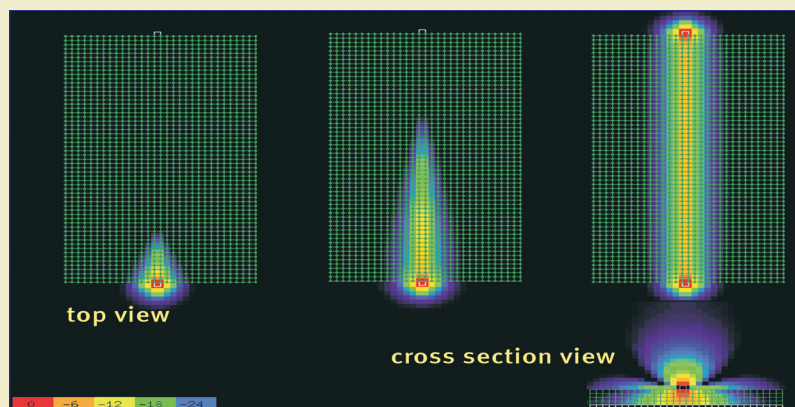
Bij inleidende colleges numerieke wiskunde heb je geleerd hoe je een lineair stelsel kunt oplossen met 'vegen'. Dit wordt een directe methode genoemd: in een eindig aantal stappen vind je (bij exact rekenen) de exacte oplossing van je stelsel. In de praktijk zul je veel problemen tegenkomen die je kunt modelleren met partiële differentiaalvergelijkingen (PDV'en). Als je een benadering probeert te vinden voor de oplossing van zo'n PDV, dan krijg je te maken met lineaire stelsels met speciale eigenschappen: ze zijn enorm groot (miljoenen onbekenden) en ze zijn ijl (de matrix bevat veel nullen). Voor dit soort stelsels zijn directe methoden niet geschikt; om ze efficiënt op te lossen moet je zogenaamde iteratieve methoden gebruiken. Iteratieve oplostechnieken zijn het hoofdonderwerp van deze cursus.

Heel vaak komt een lineair systeem voort uit het benaderen van een stationaire partiële differentiaalvergelijking, bijvoorbeeld diffusie of een stationaire stroming in een zeker gebied. Deze differentiaalvergelijking wordt dan eerst ge-discretiseerd, wat resulteert in een aantal vergelijkingen, zeg  $N$ , met



*Simulatie van een Bunsen vlam op een eindige differentie rooster*

als onbekenden de waarden op  $N$  punten in het gebied. Als je aan een 3D probleem denkt en per richting  $n$  punten zou hebben, heb je  $N = n^3$ . Zonder speciale methoden zou het geheugenbeslag al  $N^2 = n^6$  zijn en het oplossen van zo'n stelsel al  $N^3 = n^9$  bewerkingen kosten. Voor  $n = 100$  (een niet eens zo speciale keuze) is het geheugen van een computer al te klein en een directe methode zou, met een complexiteit van  $10^{18}$  en een rekensnelheid van 1 ns per bewerking, zeker 10 jaar nodig hebben. Door handig met het geheugen om te gaan en een slimme methode te gebruiken is het mogelijk dergelijke problemen toch op te lossen in ongeveer een minuut. ▲



*Eindige differentiesimulatie van de stroom door een draad*

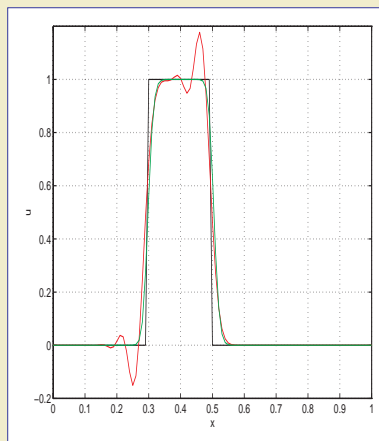
## 2WN02 Scientific Computing in Partial Differential Equations

In dit college komen tijdsafhankelijke PDV'en aan de orde. Deze vergelijkingen zijn vaak de mathematische formulering van fysische behoudswetten. Tijdsafhankelijke PDV'en kan men onderverdelen in parabolische en hyperbolische vergelijkingen. Parabolische vergelijkingen beschrijven warmtegeleiding of diffusie. Hyperbolische vergelijkingen beschrijven convectieprocessen; denk hierbij aan de voortplanting van golven op een wateroppervlak. Een combinatie van beide typen PDV'en zijn de convectie diffusie vergelijkingen, die met name van belang zijn in de (numerieke) stromingsleer.

Bovengenoemde PDV'en kun je alleen analytisch oplossen voor relatief eenvoudige problemen. Voor meer gecompliceerde problemen moet je deze vergelijkingen numeriek oplossen, waarbij je slechts een benadering van de oplossing vindt. We kiezen daarom een verzameling zogenaamde roosterpunten in het plaatsdomein en een aantal discrete tijdsniveau's, waar we de oplossing willen berekenen. In al deze roosterpunten en op alle tijdsniveau's wordt de PDV op een geschikte manier benaderd. Dit levert een numeriek schema, waar-

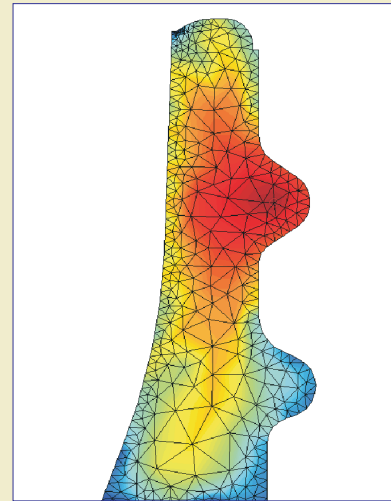
uit de oplossing berekend kan worden. Vaak vereist dit de iteratieve oplossing van een stelsel (niet-)lineaire algebraïsche vergelijkingen.

Natuurlijk is het van belang dat een fout binnen zekere tolerantiegrenzen klein te maken is. Voor praktijkproblemen is het vaak even belangrijk dat de oplossing fysisch zinvol is. Dit is minder triviaal dan het op het eerste gezicht lijkt, maar veel standaard numerieke methoden kunnen duidelijk incorrecte oplossingen opleveren, zoals bijvoorbeeld een negatieve concentratie. Om dit probleem te ondervangen zijn er speciale schema's ontworpen. Ter illustratie zijn in de figuur twee numerieke benaderingen van een blokgolf weergegeven, één berekend met een standaard schema en één met een speciaal schema. ▀



## 2WN03 Finite Element Methods

Eindige elementenmethoden zijn numerieke technieken voor het discretiseren van stationaire differentiaalvergelijkingen die voorkomen in stromingsleer, elektromagnetisme, mechanica en chemie. Ze zijn in het bijzonder erg nuttig als het om een wat ingewikkelder gebied gaat dan een rechthoek (blok) of cirkel (bol). Ze zijn dus heel flexibel.

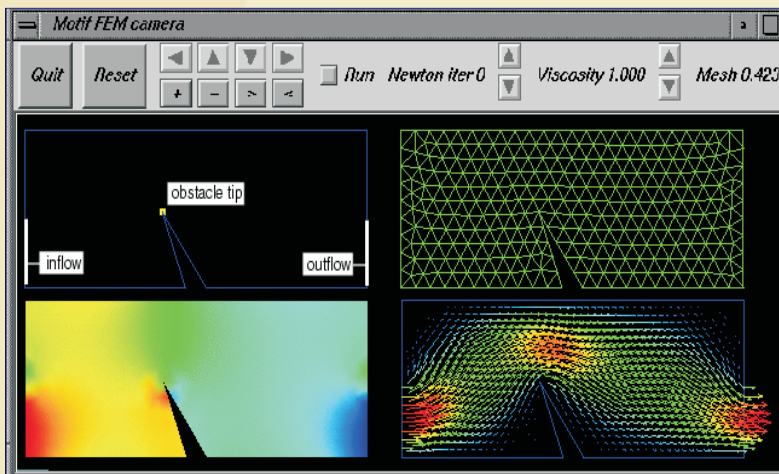


Een berekening van straling in glas op een eindige elementenrooster

Kenmerkende eigenschappen zijn dat de rekenroosters in eindige elementenmethoden heel goed details van een oplossing kunnen weergeven en dat de numerieke benadering van de oplossing een verschillende gladheid kan hebben in delen van het rekengebied. Eindige elementenmethoden lenen zich goed voor implementatie op een parallelle computer. ▀

## Meer informatie

Wil je meer informatie over de drie keuzevakken *Scientific Computing* voor niet-wiskundigen? Kijk dan op <http://www.casa.tue.nl>. Je vindt uitgebreide vakomschrijvingen in de rubriek Education. Je kunt natuurlijk ook op <http://owinfo.tue.nl> kijken. ▀



Eindige elementensimulatie van de stroming rond een obstakel