

WISB356, Utrecht, 10 september 2012

# Scientific Computing

Gerard Sleijpen

Rob Bisseling

Alessandro Sbrizzi



**Universiteit Utrecht**  
*Department of Mathematics*

<http://www.staff.science.uu.nl/~sleij101/>

## Docenten

**Gerard Sleijpen**

WG K504

G.L.G.Sleijpen@uu.nl, 030 253 1732

Rob Bisseling

WG K517

R.H.Bisseling@uu.nl, 030 253 1481

Alessandro Sbrizzi

UMC Utrecht

A.Sbrizzi@umcutrecht.nl

Ian Zwaan

# Program

- Scientific Computing
- Aspecten bij simulaties
- De stroming van het grondwater
- Werkwijze in deze cursus

# Program

- Scientific Computing
- Aspecten bij simulaties
- De stroming van het grondwater
- Werkwijze in deze cursus

# Pijlers (exacte) wetenschap

- Theorie
- Experimenten
- Computer simulaties

## Pijlers (exacte) wetenschap

- Theorie
- Experimenten
- Computer simulaties

## Scientific Computing

**Scientific Computing** is de wetenschap die efficiënte betrouwbare computer simulaties mogelijk probeert te maken voor diverse grootschalige problemen uit wetenschap en techniek.

# Pijlers (exacte) wetenschap

- Theorie
- Experimenten
- Computer simulaties

## Scientific Computing

**Scientific Computing** is de wetenschap die efficiënte betrouwbare computer simulaties mogelijk probeert te maken voor diverse grootschalige problemen uit wetenschap en techniek.

In het **eerste deel van deze cursus** simuleren we grondwaterstroming.

# Program

- Scientific Computing
- Aspecten bij simulaties
- De stroming van het grondwater
- Werkwijze in deze cursus



Aspect werkelijkheid

Modelleer



Wiskundig model

Discretiseer



Discreet model



Computer model

Implementeer



Simulatie

Aspect werkelijkheid

Modelleer



Wiskundig model

Discretiseer



Discreet model



Computer model

Implementeer



Simulatie

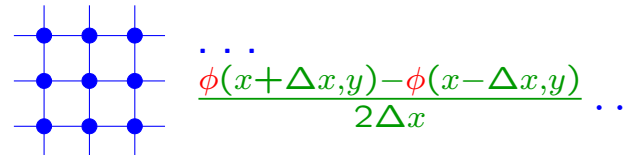
Stroming grondwater



$$\begin{aligned} -\nabla(K\nabla\phi) &= Q \text{ op } \Omega \\ -K \frac{\partial\phi}{\partial x} \cdot n &= \gamma(\phi - \phi_0) \text{ op } \partial\Omega \end{aligned}$$



Eindige differences, ...


$$\frac{\phi(x+\Delta x, y) - \phi(x-\Delta x, y)}{2\Delta x} \dots$$

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$



Iteratieve lineaire solver

Rekenschema voor het oplossen van  $\mathbf{x}$  uit  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$



C++

Simulatie

Aspect werkelijkheid

Modelleer



Wiskundig model

Discretiseer



Discreet model



Computer model

Implementeer



Simulatie

**Stroming grondwater**



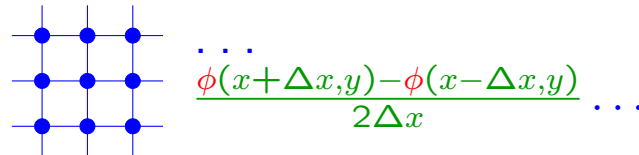
**Geofysica**

$$-\nabla(K\nabla\phi) = Q \text{ op } \Omega$$

$$-K \frac{\partial\phi}{\partial x} \cdot n = \gamma(\phi - \phi_0) \text{ op } \partial\Omega$$



**Numerieke PDEs**


$$\frac{\phi(x+\Delta x, y) - \phi(x-\Delta x, y)}{2\Delta x} \dots$$

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$



**Numerieke Lineaire Algebra**

Rekenschema voor het  
oplossen van  $\mathbf{x}$  uit  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$



**Computer Science**

Simulatie

# Program

- Scientific Computing
- Aspecten bij simulaties
- De stroming van het grondwater
- Werkwijze in deze cursus

# 1ste deel cursus: grondwaterstroming

- Het hele simulatie traject wordt bekeken
- Nadruk op praktische aspecten
- Nadruk op het oplossen van  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

# 1ste deel cursus: grondwaterstroming

- Het hele simulatie traject wordt bekeken
- Nadruk op praktische aspecten
- Nadruk op het oplossen van  $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

## Los op $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

Voor de provincie Utrecht

met rekenpunten in Noord-Zuid en Oost-West richting  
om de 100m, & 20 rekenpunten in de diepte

$\Rightarrow 5 \cdot 10^6$  **onbekenden.**

Gauss eliminatie (efficiëntste variant) vereist

$6 \cdot 10^5$  Tera flop:  $1 \text{ Tflop/s} \Rightarrow \approx 10 \text{ uur} \quad :-)$

Iteratieve lineaire solver op een workstation:

$42 \text{ seconde} \quad :-)$

# Program

- Scientific Computing
- Aspecten bij simulaties
- De stroming van het grondwater
- Werkwijze in deze cursus

# Werkwijze in de cursus

- **Studio course**

De cursus is in de computerzaal; theorie, werkcollege & computerpracticum zijn geïntegreerd en het geleerde wordt onmiddellijk in de praktijk gebracht



# Werkwijze in de cursus

- **Studio course**

De cursus is in de computerzaal; theorie, werkcollege & computerpracticum zijn geïntegreerd en het geleerde wordt onmiddellijk in de praktijk gebracht

- **Voorkennis:**
  - Calculus
  - Lineaire algebra
  - wat programmeer ervaring
    - ervaring met Numerieke Wiskunde of met MATLAB hoeft niet, helpt wel
    - voor, met name het eerste deel vd cursus, ligt er een deel van de code*

# Werkwijze in de cursus

- **Studio course**

De cursus is in de computerzaal; theorie, werkcollege & computerpracticum zijn geïntegreerd en het geleerde wordt onmiddellijk in de praktijk gebracht

- **Voorkennis:**
  - Calculus
  - Lineaire algebra
  - wat programmeer ervaring
    - ervaring met Numerieke Wiskunde of met MATLAB hoeft niet, helpt wel
    - voor, met name het eerste deel vd cursus, ligt er een deel van de code*

- **Afsluiting** van de cursus middels drie verslagen (over Moduul 1, Moduul2, Moduul4)

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

Leer van de **practicum handleiding** of **boek** en van  
(*in willekeurige volgorde*) **jezelf (door te doen)**  
**de docent,**  
**de assistent**  
**elkaar**  
**de literatuur,**  
**internet**  
**...**

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

Leer van de **practicum handleiding** of **boek** en van  
(*in willekeurige volgorde*) **jezelf (door te doen)**  
**de docent,**  
**de assistent**  
**elkaar**  
**de literatuur,**  
**internet**  
**...**

**Aanwezigheid verplicht**

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

○ Programma's (af)schrijven

Tijdens de cursus schrijf jezelf de programma's af. Dit is dus individueel werk.

je leert hierbij de wiskundige en numerieke principes en je leert MATLAB programmeren

Als je een verslag schrijft dan kan je dat in overleg samen doen met nul à twee andere studenten (team werk). Je kunt dan ook samen (verder) aan de code verder afschrijven

genereer varianten, analyseer resultaten

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

○ Verslag mag je samen met anderen schrijven  
echter

- 1) nabespreking bepaalt het cijfer
- 2) iedere auteur is volledig verantwoordelijk voor het **geheel**
- 3) maak duidelijk wie wat geschreven heeft

- Doen:**
- Studeren, programmeren voorbereiden
  - Programma's (af)schrijven
  - Verslag schrijven (voor sommige delen)

○ Verslag mag je samen met anderen schrijven  
echter

- 1) nabespreking bepaalt het cijfer
- 2) iedere auteur is volledig verantwoordelijk voor het **geheel**
- 3) maak duidelijk wie wat geschreven heeft

In verslag: theoretische beschouwing  
voorspelling  
numeriek experiment  
discussie  
conclusie

Eventueel in appendix (deel van de) code,  
met name als je (slimme) code bespreekt in het verslag