



INHOUDSOPGAVE

3 Rabobank steunt CONTACT ontwikkeling

4 Riolen inspecteren zonder vieze voeten

5 VORtech breidt uit

6 High Performance Computing voor de Industrie

7 Kort nieuws

8 SymPy: de kracht van symbolische rekenen

VORtech bv

Postbus 260, 2600 AG Delft

Tel. 015 - 285 01 25

Fax. 015 - 285 01 26

Bezoekadres: Gebouw Torenhove,
Martinus Nijhofflaan 2, Delft

www.vortech.nl

De wereld wordt smart

Systemen die efficiënt en betrouwbaar inspelen op complexe omstandigheden, dat is de belofte van Smart Systems. Of het nu gaat om ons elektriciteitsnet, onze gasvoorziening of onze waterleidingen: de vraagstukken zijn steeds dezelfde. Toegepaste wiskunde is een essentieel hulpmiddel om deze vraagstukken op te lossen.

De belangstelling voor Smart Systems is ontstaan door het samenvallen van twee ontwikkelingen.

De eerste ontwikkeling is dat er nieuwe en strengere eisen gesteld worden aan de distributiesystemen voor elektriciteit, gas en water. Denk bijvoorbeeld aan de dynamische internationale handel in elektriciteit en gas, waardoor er grote voordelen te halen zijn in het snel kunnen schakelen tussen verschillende leveranciers. Bovendien is onze maatschappij steeds meer gaan rekenen op betrouwbare leverantie, waardoor storingen grote gevolgen hebben. Als computers

stilvallen bij een grote stroomstoring is er direct een flinke economische schade.

De tweede ontwikkeling, die daar naadloos inpast, is dat het door moderne goedkope communicatiemiddelen mogelijk wordt om op een heel fijnmazige schaal te gaan meten en regelen. Daardoor kan ook daadwerkelijk ingespeeld worden op dit soort nieuwe uitdagingen.

Nieuwe mogelijkheden

In feite spelen deze ontwikkelingen op heel veel gebieden. IBM erkende dit vijf jaar geleden al toen ze haar programma lanceerde om de wereld smart te maken. Op het gebied van het elektriciteitsnetwerk zijn de ontwikkelingen waarschijnlijk het verst. Al drie jaar geleden kwam Stedin in het nieuws met de installatie van slimme schakelaars in Rotterdam. Daardoor kan heel nauwkeurig gezien worden waar een storing optreedt zodat de onderhoudsploeg direct naar de juiste plek wordt gestuurd. Bovendien kan bij een storing snel geschakeld worden zodat via

*Systemen die efficiënt en
betrouwbaar inspelen
op complexe omstan-
digheden*



een andere route alle huizen snel weer van stroom voorzien worden.

Dit is nog maar het begin, want de mogelijkheden reiken veel verder. In theorie kan er bijvoorbeeld gebruik gemaakt worden van een veel dynamischere prijsstelling dan de huidige dag- en nachtstroom. Op ieder moment kan de actuele prijs van de stroom elektronisch doorgegeven worden aan de klant. Die kan daar op inspelen door apparaten aan te sluiten die hun gedrag bepalen op basis van de actuele prijs van de stroom: een afwasmachine gaat dan pas draaien op het moment dat de prijs onder een bepaald niveau komt. Hiermee wordt al volop geëxperimenteerd, bijvoorbeeld in een proefproject in de Groningse wijk Hoogkerk.

Leveranciers, distributeurs en afnemers gaan dus allemaal een actieve rol spelen in het gebruik van het netwerk. Door de veelheid aan actoren in het netwerk kan dit niet langer met de hand gestuurd worden maar moet het systeem zelf slim keuzes maken. Het systeem moet dus smart zijn.

Toegepaste wiskunde

Zulke slimme systemen vormen een enorme uitdaging. Zowel in Europa als in Amerika

Toegepaste wiskunde is essentieel om systemen smart te maken

en Azië lopen grote onderzoeksprogramma's. Toegepaste wiskunde is een essentiële tool om de vraagstukken op te lossen.

Het begint al bij het monitoren. Hoe kun je bepalen of de waardes die een meter afgeeft wel kloppen. En als je ergens een afwijkende waarde meet, wat is er dan precies aan de hand? Hoe kun je zien of een meter stuk is? Is de eindgebruiker net met vakantie gegaan, of heeft hij een veel zuinigere wasmachine gekocht? Met traditionele signaalanalyse kom je al een heel eind. Maar om goed vast te stellen wat er in een netwerk fout gaat zul je toch iets van wiskundige modellering moeten doen. Door het toepassen van data-assimilatie kun je zo'n model combineren met metingen om een goed beeld van de actuele toestand te krijgen.

Zo'n wiskundig model is niet alleen nodig om de toestand van het systeem in kaart te brengen. Je zult het ook nodig hebben om te voorspellen wat er in een netwerk gaat gebeuren zodat je daar optimaal op kunt anticiperen. Bovendien zul je het effect van ingrepen moeten kunnen voorspellen want

bij zeer complexe systemen is de intuïtie van operators waarschijnlijk een slechte raadgever.

Eigenlijk lost een slim netwerk voortdurend dynamische optimalisatieproblemen op. Daarvoor is het nodig dat het wiskundig model heel snel doorgerekend kan worden waarbij bovendien rekening gehouden kan worden met allerlei onzekerheden. Dat vergt het maximale van slimme en efficiënte algoritmen en dus ook weer een greep in de gereedschapskist van de toegepaste wiskunde.

Toekomst

Kortom: er is in de ontwikkeling van slimme systemen een grote rol weggelegd voor het oplossen van wiskundige vraagstukken. En dat moet ook direct goed gebeuren: kleine fouten kunnen grote gevolgen hebben in systemen zoals onze elektriciteitsvoorziening en de levering van water. Niet voor niets stelde de directeur van Alliander kortgeleden in een voordracht dat wiskunde waarschijnlijk een kernexpertise zou worden in zijn bedrijf. Voor toegepaste wiskunde breken gouden tijden aan. •

Rabobank steunt CONTACT ontwikkeling

Een flinke donatie van het Innovatiefonds van de Rabobank Zuid-Holland Midden is een goede stimulans voor de ontwikkeling van onze contact-mechanica software. Daarmee kan in de toekomst het onderhoud van treinwielen verbeterd worden, kan de kans op treinongelukken worden verkleind en kan de geluidsoverlast van treinen worden teruggebracht.



“De bijdrage aan de maatschappij is een belangrijk criterium”

VORtech heeft een donatie gekregen van € 10.000,- van het Innovatiefonds van Rabobank Zuid-Holland Midden voor de verdere ontwikkeling en marketing van de CONTACT software. Het Innovatiefonds ondersteunt innovatieve projecten die zich nog niet economisch hebben bewezen maar wel commercieel perspectief hebben. Belangrijke criteria zijn de bijdrage aan de maatschappij en aan het milieu.

Begrijpen hoe wrijving werkt

De CONTACT software dient voor het simuleren van de interacties tussen treinwielen en rails. Het berekent de wrijvingskracht die ontstaat ten gevolge van de beweging van het wiel. Dit is van belang voor de efficiëntie van de aandrijving, de remweg op

glad spoor en, in speciale gevallen, om ontsporing van een trein te voorkomen. Verder zorgt de wrijving voor slijtage van wielen en rails, en treden er door het kleine contactoppervlak beschadigingen op (“rolling contact fatigue”, zogenaamde head checks en squats). Met CONTACT wordt onderzoek gedaan naar de onderliggende mechanismes en worden de profielen van wielen en rails geoptimaliseerd.

Edwin Vollebregt van VORtech is al sinds 2009 bezig om CONTACT verder te ontwikkelen. Aanvankelijk gebeurde dat vanuit VORtech maar sinds begin dit jaar ook middels een aanstelling bij de TU Delft. Er is vooral veel vooruitgang bereikt op het gebied van wrijving en slijtage. Edwin:

“vreemd genoeg begrijpt eigenlijk niemand goed hoe wrijving nou eigenlijk werkt. Het is onduidelijk wat de invloed is van microscopische ruwheid van de oppervlakken, van regen en vervuiling en van de temperatuur van het contactoppervlak. Daardoor zie je dat er allerlei empirische modellen zijn die voor bepaalde situaties redelijk werken maar voor andere weer helemaal niet. We lijken nu een manier gevonden te hebben om wrijving op een meer fundamentele manier te beschrijven, waardoor ons model veel betrouwbaarder is dan de gangbare modellen”.

Daarnaast werkt Edwin nu aan het modelleren van materialen die niet staalhard zijn. “Als de materialen ook echt een vervormend effect op elkaar hebben veranderd het hele contactvraagstuk. Maar dit is wel wat er in werkelijkheid gebeurt”, aldus Edwin.

Betere modellen

Hoewel CONTACT de werkelijkheid fysisch zeer gedegen modelleert, werd het tot voor kort nauwelijks gebruikt in de dagelijkse praktijk. Dat kwam door de benodigde rekestijd en door de afwerking van de programmatuur. Door het werk van Edwin is ook daar veel aan verbeterd: het programma is inmiddels flink versneld, gemakkelijker in het gebruik en gekoppeld aan SIMPACK Rail, een simulatiepakket voor railvoertuigen.

De bijdrage uit het Innovatiefonds zal worden gebruikt om deze grote verbeteringen nog meer dan nu in praktijktoepassingen te laten landen, via marketing en ondersteuning van een proefproject. Daarmee draagt de Rabobank bij aan het verminderen van energie- en materiaalgebruik van de spoorsector. •

Riolen inspecteren zonder vieze voeten

Het rioelstelsel in Nederland is enorm: de totale lengte is meer dan 100.000 km. De riolering is ondermeer bedoeld om tijdens hevige buien het regenwater af te voeren en wateroverlast te voorkomen. Obstructies in het riool, zoals boomwortels en vet, maken de kans op wateroverlast groter. Het opsporen van die problemen gebeurt momenteel met visuele inspecties van binnenuit, maar dat is duur en niet altijd even effectief. VORtech ontwikkelt samen met Witteveen+Bos technieken om problemen in het riool op te sporen op basis van metingen die toch al gedaan worden of makkelijk kunnen worden gedaan.



“Dit was precies de tool die ik nodig had”

Hans Korving van Witteveen+Bos is al meer dan 15 jaar bezig met rioleringen. Al tijdens zijn promotieonderzoek probeerde hij het beheer van de riolering op een hoger plan te brengen door meer met computermodellen te werken. Daarna is hij als ingenieur betrokken geweest bij tal van projecten rondom ons afvoerstelsel. Hij kan er smakelijke verhalen over vertellen. Of liever gezegd onsmakelijk: “je staat er soms van te kijken wat er allemaal in rioleringen terecht komt. Soms complete matrassen waarvan je je afvraagt hoe die daar terecht konden komen” aldus Hans.

Onvolledig beeld

Maar problemen worden niet alleen

veroorzaakt door wat er in de riolen zit. De echte oorzaak kan ook buiten het riool liggen. Boomwortels die een riool binnen groeien en bouwwerkzaamheden die verzakkingen of zelfs breuken van de rioolbuizen veroorzaken. Door middel van inspecties proberen de rioolbeheerders dat soort storingen op te sporen. Maar die inspecties zijn duur, arbeidsintensief en gebeuren vaak maar één keer in de 5 tot 10 jaar. Hans Korving: “in praktijk zie je dat er dus een onvolledig beeld is van de toestand van het riool”.

Gaandeweg kreeg Hans het idee dat het mogelijk zou moeten zijn om de toestand van het afvoerstelsel te monitoren aan de

hand van eenvoudige waterstandsmetingen die permanent gedaan kunnen worden. Toen hij twee jaar geleden de gratis data-assimilatieomgeving OpenDA tegenkwam, was de match snel gemaakt. Hans: “dit was precies de tool die ik nodig had. Hiermee zouden we waterstandsmetingen kunnen terugvertalen naar verstoringen in het rioelstelsel. Op die manier kunnen we continu problemen opsporen en heel gericht onderhoud plegen. De verwachte toename in kosteneffectiviteit is groot”.

Data assimilatie

Hans Korving beschrijft hoe de methode uiteindelijk moet gaan werken: “We beginnen met metingen van een schoon riool. We maken een model dat die metingen goed kan beschrijven. Daarna gaan we, in principe continu, het model herkalibreren op basis van de nieuwste metingen. Zodra we dan ergens bijvoorbeeld de stromingsweerstand in een van de buizen zien toenemen, weten we dat daar iets aan de hand is. De vraag is nu of we met bestaande metingen voldoende nauwkeurig kunnen zeggen waar de problemen optreden. Zo niet, dan kunnen we kijken welke metingen we eigenlijk zouden moeten hebben om dat wel te kunnen”.

Onder begeleiding van VORtech en Witteveen+Bos is Daniel Mulder nu bezig met een afstudeerproject om te kijken of het ook echt kan. Daniel is student bij de faculteit toegepaste wiskunde van de TU Delft. Daniel: “om het riool te simuleren gebruiken we het programma Sobek van Deltares. Daarmee hebben we een model gemaakt van het rioelstelsel van Delft.

Vervolgens hebben we Sobek gekoppeld aan OpenDA, zodat we metingen kunnen gebruiken om het model automatisch te kalibreren. We zien dat dat meestal verrassend goed gaat. Maar in bepaalde situaties lijkt het dan ineens weer nergens op. We proberen nu te begrijpen wat er dan precies mis gaat". Hans Korving: "We zijn er duidelijk nog niet, maar het principe lijkt te werken. Voor het project 'Slim meten en

monitoren in Delft' biedt het grote kansen. Op basis van die ervaringen kan het verder worden uitgerold".

OpenDA

Dit is één van de vele ontwikkelingen die rond OpenDA plaatsvinden. De toolbox is inmiddels duidelijk onder de aandacht gekomen van een grote en internationale groep ontwikkelaars die voor de opgave staat om

OpenDA is gevonden door een grote groep ontwikkelaars

metingen en modellen te combineren. Als u meer wilt weten over OpenDA, kijk dan op www.openda.org of neem contact op met VORtech. •

VORtech breidt uit

VORtech lijkt voorlopig weinig last te hebben van de crisis: we hebben afgelopen maanden twee nieuwe collega's mogen verwelkomen en ook voegen we een flink stuk ruimte toe aan ons kantoor.



Nieuwe collega's

Onze nieuwe collega's zijn Arthur Bakker en Dirk van Eijkeren. Arthur is twee jaar geleden afgestudeerd als sterrenkundige. In zijn afstudeerwerk heeft hij data van de LOFAR radio telescoop verwerkt en programmatuur gemaakt om bestaande radio databases te doorzoeken. Na enkele omzwervingen is hij in december 2012 bij VORtech begonnen. Als gecertificeerd C# programmeur zal hij vooral een versterking zijn voor de groep binnen VORtech die zich bezig houdt met ontwikkeling onder Windows.



Dirk van Eijkeren is in mei bij ons begonnen. Hij promoveert binnenkort op het modelleren van roterende stromingsvelden en de beweging van deeltjes daarin. Hij begint binnen VORtech in de groep die zich bezig houdt met programmatuur voor olie-exploratie.

Uitbreiding van het kantoor

Met de personele groei van afgelopen jaren begon de kantoorruimte te krap te worden. Het meest acuut was de lunchruimte. Marieke Dezaire, office manager bij VORtech: "We proberen nog zoveel mogelijk

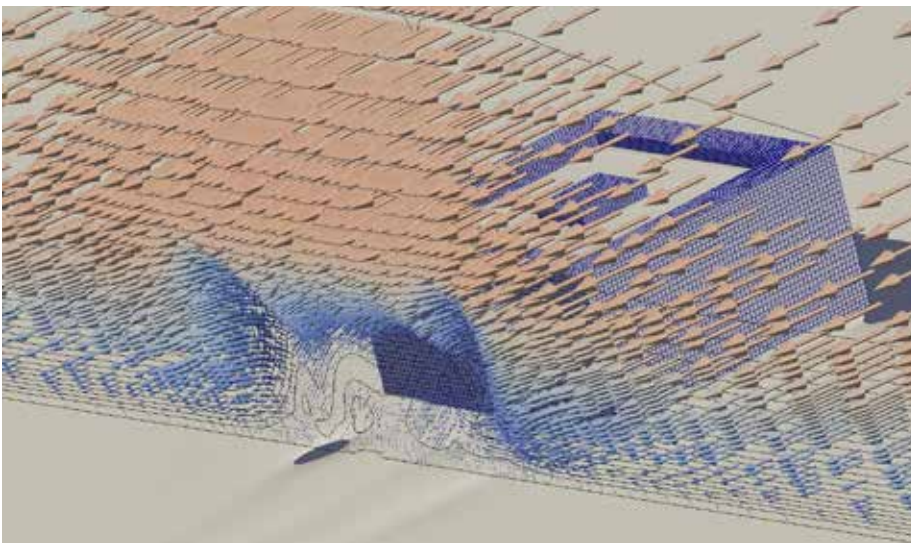
gezamenlijk te lunchen, maar als iedereen op kantoor is dan past het niet meer in de lunchruimte. Temeer omdat we vaak gasten op bezoek hebben".

Toen begin dit jaar de burens gingen verhuizen, was de keuze dan ook snel gemaakt om een flink deel van hun kantoorruimte over te nemen. Het totale vloeroppervlak verdubbelt bijna. Marieke: "De uitdaging was vooral om het qua inrichting tot een geheel te maken. Daarbij hadden de collega's ook nog allerlei wensen, van een makkelijke bank tot een karaokebar". Dat laatste is er niet van gekomen, maar we hebben wel een ruimte gekregen waarin we informeel bij elkaar kunnen zitten en een aparte presentatieruimte. En natuurlijk een veel grotere lunchruimte. U bent van harte welkom voor een kop koffie en een rondleiding.



High Performance Computing voor de Industrie

Voor veel industrieën is het van levensbelang om een nieuw product snel te kunnen ontwikkelen. Of om een product te kunnen maken dat superieur is aan dat van de concurrent. In deze concurrentieslag is het vermogen om grote rekenkracht in te zetten essentieel. Het internationale UberCloud experiment en het nieuwe Europese programma Fortissimo helpen de industrie om high performance computing in hun processen in te voeren.



Extreem krachtige computers worden door de industrie nog veel te weinig gebruikt. Dat is althans de mening van Koos Huijsen, de HPC coördinator binnen VORtech. Koos: "Op dit moment zijn het vooral de grote bedrijven en enkele speciale sectoren die HPC gebruiken. Maar er zijn nog veel industrieën die dat niet doen. En dat is zonde", aldus Koos. "Met simulaties kan je je productontwerpen vroegtijdig verbeteren en dus producten maken die beter zijn dan die van je concurrent. En als je niet eindeloos op je berekeningen hoeft te wachten, kun je je product sneller op de markt brengen".

De opkomst van Cloud omgevingen verlaagt de drempel voor het gebruik van grootschalige berekeningen enorm. Koos: "In de industrie maken mensen vooral gebruik van de Cloud door het draaien van voorgeïnstalleerde toepassingen. Bijvoorbeeld voor computational fluid dynamics

(CFD). Ze gebruiken dat pakket dan bijna net zoals ze gewend zijn, maar ze kunnen wel een heel groot aantal processoren inzetten voor het echte rekenwerk. Ze hoeven dus niet veel te leren om gebruik te maken van High Performance Computing". De crux zit hem volgens Koos in het zorgen dat de juiste applicaties beschikbaar komen in de Cloud.

Overheden komen in actie

Dit heeft nu ook de aandacht gekregen van beleidsmakers. Onder andere in Amerika en Europa zijn initiatieven gestart om HPC

Wie sneller ontwerpt, is eerder op de markt

naar de werkvloer te brengen. Een internationaal initiatief is het UberCloud experiment. Koos: "Hoewel de naam van het experiment wat ongemakkelijk klinkt, is

het een heel mooie manier om het gebruik van HPC in de industrie te stimuleren. In feite biedt het initiatief een makelaarsfunctie, waarbij eindgebruikers gekoppeld worden aan HPC-experts, leveranciers van rekenkracht en applicatieontwikkelaars. In de vorm van korte projecten (experimenten) wordt voor een eindgebruiker een voorziening ingericht waarmee hij of zij grootschalige rekenkracht kan inzetten binnen zijn of haar werkproces".

Sneeuwjacht

VORtech heeft als HPC expert deelgenomen aan zo'n experiment. Het doel daarvan was om een simulatiemodel voor sneeuwjacht toegankelijk te maken voor ontwerpers van gebouwen. Met deze applicatie, van het Canadese bedrijf Binkz, kunnen die ontwerpers nagaan waar sneeuw zich gaat ophopen in hun ontwerp, en waar dus grote mechanische belasting kan ontstaan. In Nederland is dat zelden een issue, maar in Scandinavië en Canada zijn sneeuwlasten wel degelijk van belang. Ziad Boutanios, principal engineer bij Binkz: "De benadering van Binkz is de meest geavanceerde die op dit moment op de markt is, maar vergt wel veel meer rekenkracht omdat er veel nauwkeuriger gerekend wordt en omdat er een uniek fysisch model gebruikt wordt". Vandaar dat een HPC Cloud een interessant platform is.

Tijdens het experiment werd meteen duidelijk dat het gebruik van HPC in een Cloud omgeving voor eindgebruikers weliswaar

laagdrempelig is, maar voor de aanbieders best wat hoofdbreken kost. Afhankelijk van welke Cloud-aanbieder je kiest, kan het inrichten van een applicatie veel exper-

Kort nieuws

tise vergen. Vandaar ook dat het UberCloud initiatief in een behoefte voorziet.

Fortissimo

Een vergelijkbaar initiatief is het Europese project Fortissimo. Ook dit heeft tot doel om rekenkracht naar de industrie te brengen. In Nederland wordt het initiatief getrokken door het nationale HPC en e-Science support center SURFsara. Ze heeft van de Nederlandse overheid de taak gekregen om haar kennis en expertise meer in te zetten voor het bedrijfsleven. Het Fortissimo project is daar een prima middel voor. Koos Huijssen: "Ook hier gaan weer experimenten gedaan worden om te demonstreren dat HPC veel meerwaarde kan opleveren voor de industrie. Doordat eindgebruikers meedraaien in deze experimenten wordt voor hen meteen de drempel verlaagd". VORtech draait mee in één van de experimenten.

De eerste ronde experimenten is al gedefinieerd in het Fortissimo voorstel, en in oktober is de open inschrijving voor de tweede ronde gestart. Middels dit project kunt u fondsen en rekentijd krijgen voor het uitvoeren van grootschalige berekeningen op de infrastructuur. Dus als u belangstelling heeft om HPC eens voor uw bedrijf uit te proberen, laat het dan vooral weten. •



Dit project wordt gefinancierd door het zevende kader programma van de Europese Unie, Grant Agreement No 609029

Zie ook: www.hpcexperiment.com,
www.fortissimo-project.eu

Financiële rekensoftware

VORtech houdt zich traditioneel bezig met software voor technisch-wetenschappelijke berekeningen. Maar veel van de wiskundige kennis en software engineering vaardigheden zijn ook heel nuttig voor andere vakgebieden. Zo biedt VORtech sinds kort ook diensten aan voor de financiële sector. De kern van ons aanbod ligt ook daar op het verhogen van de kwaliteit van complexe rekensoftware, op high performance computing en op algoritmische vraagstukken. Met deze nieuwe diensten richten we ons onder andere op banken en verzekeraars. In een volgende nieuwsbrief zullen we uitgebreider stilstaan bij onze diensten voor de financiële sector.

Clean Sky

Voor haar dochteronderneming Asimptote is VORtech per 1 mei begonnen aan het ModelicaProp project. Dit is een Europees project in het kader van het Clean Sky programma, dat er op gericht is om technieken te ontwikkelen die de luchtvaart schoner maken. Het doel van het ModelicaProp project is om een nieuwe bibliotheek te ontwikkelen voor het berekenen van thermodynamische eigenschappen van vloeistoffen en gassen binnen de Modelica modelleringsomgeving. De bulk van het werk gebeurt door onze partner, het Zweedse bedrijf Modelon. VORtech is verantwoordelijk voor het ontwikkelen van een CAPE-OPEN interface waarmee externe bibliotheken aangeroepen kunnen worden vanuit de Modelica bibliotheek. Asimptote's FluidProp bibliotheek is één van de externe bibliotheken die op deze manier vanuit Modelica benaderd moet kunnen worden. In een volgende nieuwsbrief zullen we uitgebreider stilstaan bij dit project en bij de Modelica omgeving, die snel aan populariteit wint.

VORtech sponsor Woudschoten Conferentie

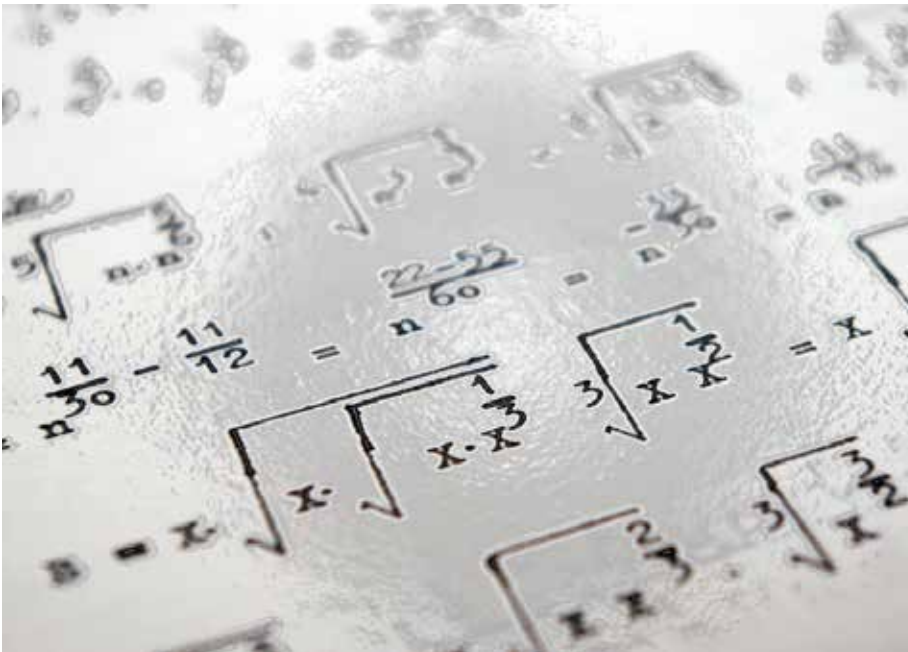
VORtech was dit jaar sponsor van de Woudschoten conferentie. Dit is een jaarlijks evenement van de Werkgemeenschap voor Scientific Computing (WSC). Ieder jaar gaan er ook enkele VORtechers naar toe om zich op de hoogte te stellen van interessante ontwikkelingen in de wiskunde en om kennissen uit het vakgebied weer eens te ontmoeten. De keuze om dit evenement te steunen was dan ook snel gemaakt, temeer daar we als bedrijf ook de ontwikkeling van de toegepaste wiskunde in Nederland willen stimuleren. De thema's dit jaar waren 'adaptieve eindige-elementenmethodes' en 'inverse modellen en onzekerheidskwantificering', beiden zeer relevant voor het werk bij VORtech. Voor meer informatie, zie <http://wsc.project.cwi.nl/conferentieN.php>.

VORtech partner van 3TU.AMI

VORtech is één van de bedrijven die bezig zijn een samenwerking op te zetten met 3TU.AMI, het instituut voor toegepaste wiskunde van de drie samenwerkende technische universiteiten. Voor de bedrijven biedt de samenwerking een laagdrempelige toegang tot kennis bij de universiteiten, zichtbaarheid bij afstudeerders en promovendi, die mogelijk nieuwe collega's kunnen zijn, en de mogelijkheid om met de universiteiten samen projecten te doen. Voor de universiteiten heeft de samenwerking als voordeel dat ze hun studenten makkelijk praktische ervaring kunnen laten opdoen binnen de aangesloten bedrijven, dat ze natuurlijke sponsors hebben voor evenementen en dat ze een full-service kunnen aanbieden richting derden: niet alleen het onderzoek, maar ook de implementatie. •

SymPy: de kracht van symbolische rekenen

Bij het werk aan wiskundige modelsoftware speelt het manipuleren van formules een belangrijke rol. Traditionele software hiervoor was duur en onhandig. De Python module SymPy lijkt een oplossing te bieden.



SymPy blijkt heel toegankelijk en krachtig te zijn

VORtech heeft zich altijd vooral met numerieke berekeningen bezig gehouden. Bij onze klanten gaan die berekeningen altijd over een model van de echte wereld buiten onze computers. Om die berekeningen goed te doen, zullen we goed moeten kijken naar het model zelf. Als we het fenomeen beter begrijpen, dan kunnen we verderop in het proces een betere (betrouwbaardere en efficiëntere) numerieke benadering maken.

Modellen ontwikkelen

Bij het ontwikkelen van rekensoftware onderkennen we de volgende stappen:

1. Bij het modelleren gaat het over het verschijnsel zoals zich dat in werkelijkheid voordoet, en de vraag is dan: hoe kan dit worden beschreven in een wiskundig model.
2. Bij de wiskundige analyse gebruiken we

technieken om bepaalde eigenschappen van het model te bepalen, zoals specifieke oplossingen, bewijsbare eigenschappen van de oplossingen en termen die verwaarloosd kunnen worden.

3. Vaak is dan een discretisatie nodig om het continu probleem (een waarde in ieder punt) om te zetten naar een discreet probleem (een waarde alleen in roosterpunten).
4. Vervolgens moet er een efficiënte strategie bedacht worden voor het oplossen van het discrete probleem.
5. En tenslotte moet die oplosstrategie ondersteund worden door efficiënte en betrouwbare software die ook goed te onderhouden is.

Stappen 2 en 3 (maar vaak ook de andere stappen) omvatten symbolische berekeningen, waarbij formules worden gemanipuleerd. Dat wordt vaak met de hand

gedaan omdat het een creatief proces is waarin intelligente keuzes moeten worden gemaakt. Maar in sommige gevallen zijn de formules dermate complex dat handmatig werk erg arbeidsintensief is en makkelijk tot fouten kan leiden.

Symbolisch rekenen

Computers kunnen heel handig zijn bij het werken met wiskundige formules omdat ze resultaten sneller en betrouwbaarder kunnen verkrijgen dan door handmatige formulemanipulatie. Maar tot voor kort was de software die nodig is voor computerondersteunde symbolische berekeningen te duur en/of te lastig in gebruik voor een commercieel bedrijf als VORtech: de investering die nodig zou zijn in geld en inwerktijd was zodanig dat we altijd kozen voor handmatige in plaats van computerondersteunde analyse.

De Python module SymPy lijkt daarvoor de oplossing. Kortgeleden hebben we deze module gebruikt voor de analyse van het 'insnoeren' van metalen staven, wat één van de manieren is waarop een staaf kan beginnen met breken. De gratis module SymPy bleek heel toegankelijk en krachtig te zijn. En veel minder nukkig dan de bestaande standaardpakketten, zoals Mathematica en Maple.

Python opent trouwens meer interessante mogelijkheden. Het biedt ook tools voor (Matlab-style) numerieke berekeningen en visualisaties, en voor gebruikersinterfaces en file-manipulatie. Al deze dingen doen we dagelijks bij VORtech, maar nooit binnen één en dezelfde omgeving. Python heeft dan ook veel potentie om een belangrijke ontwikkeltool voor ons te worden. •