



Two-level preconditioned conjugate gradient methods with applications to bubbly flow problems

Jok Tang

‘Wiskundige maakt mayo lekkerder’, kopte *De Telegraaf* een dag na de promotie van Jok Tang op 8 september 2008 aan de Technische Universiteit Delft. Zo’n kop maakt stiekem nieuwsgieriger dan de titel van zijn proefschrift: *Two-level preconditioned conjugate gradient methods with applications to bubbly flow problems*. De vraag rijst wat de relatie tussen lekkere mayonaise en de tweelaags gepreconditioneerde Krylovmethoden uit zijn proefschrift is. Korte tijd na zijn promotie legt Jok het uit: “Mayonaise is eigenlijk een emulsie van kleine oliedruppeltjes in water. Wanneer de druppeltjes van deze emulsie niet klein genoeg zijn geworden tijdens het productieproces, zoals vaak bij handgemaakte mayonaise gebeurt, vindt na verloop van tijd ontmenging plaats. Dat gaat ten koste van de kwaliteit van de mayonaise. Om het productieproces te testen en te begrijpen hoe de ontmenging plaatsvindt, kunnen experimenten gedaan worden. Het gedrag van de emulsie kan echter net zo goed met computersimulaties bestudeerd worden: er moet dan een stroming van oliedruppels in water berekend worden.” Dat is echter gemakkelijker gezegd dan gedaan, want met de huidige rekenmethodes kan het zelfs op een supercomputer dagen of weken duren om het gedrag van een bellenstroom voor één minuutje te voorspellen. Onder begeleiding van promotor Kees Vuik ontwikkelde Jok snellere methoden die de rekentijd aanzienlijk kunnen verkorten.

Bellen in vloeistof simuleren

Het gedrag van bellen in een vloeistof is niet alleen van belang bij het maken van mayonaise en andere producten in de levensmiddelenindustrie, maar bijvoorbeeld ook bij de scheiding van olie en water in de olie-industrie, of het gedrag van inktdruppeltjes bij printers. Wiskundige modellen voor de beschrijving van een vloeistof met bellen zijn gebaseerd op de niet-samendrukbare Navier-Stokesvergelijkingen met daaraan gekoppeld vergelijkingen voor de beweging van de bellen. Deze worden doorgaans numeriek opgelost, waarbij grote lineaire systemen een belangrijke rol spelen. De lineaire systemen kunnen efficiënt worden opgelost met behulp van iteratieve methoden, zoals Krylovmethoden. De convergentie daarvan hangt echter nauw samen met de conditie van de coëfficiëntenmatrix en helaas is die voor problemen met vele bellen in een vloeistof doorgaans slecht. Langzame convergentie van huidige Krylovoplosmethoden is het gevolg. In het proefschrift van Jok worden nieuwe oplosmethoden aangedragen, zogenaamde ‘tweelaags gepreconditioneerde Krylovmethoden’. Deze kunnen de systemen vele malen sneller oplossen. De truc is eigenlijk om de vertragende componenten in de slecht-geconditioneerde coëfficiëntenmatrix te projecteren, zodanig dat ze niet meer worden herkend door het iteratieve proces. Daardoor versnelt het proces. Voor problemen met een op te lossen lineair systeem met 1 miljoen onbe-

Pas gepromoveerden brengen hun werk onder de aandacht.

Redacteur: Geertje Hek
la Voie-du-Coin 7
1218 Grand-Saconnex
Zwitserland
G.M.Hek@uva.nl

kenden scheelt het aantal benodigde iteraties al gauw een factor 10 en wordt de rekentijd ongeveer een factor 3 kleiner. Deze factoren worden alleen maar groter wanneer het aantal onbekenden wordt opgevoerd om realistischere testproblemen door te rekenen. Derhalve kunnen simulaties van bellen in een vloeistof veel efficiënter worden uitgevoerd dan voorheen. Dat vindt Jok ook meteen het belangrijkste resultaat in zijn proefschrift: "Diverse praktische problemen die in eerste instantie niet op te lossen leken zijn nu ineens wel benaderbaar. Tweelaags gepreconditioneerde Krylovmethoden zijn eigenlijk onontbeerlijk voor het doorrekenen van modellen om bellen te simuleren."

Vruchtbare samenwerkingen

Het leven als aio vond Jok geweldig. Hij heeft niet alleen veel geleerd en gedaan maar ook veel plezier gehad. Hij is in al die jaren naar eigen zeggen uitstekend begeleid door zijn promotor Kees Vuik en heeft veel aan hem te danken. Het onderzoek kon hij uitvoeren in volledige vrijheid. Bijna wekelijks besprak hij de voortgang met Kees Vuik, die actief meedacht met het onderzoek en hielp wanneer het vastliep of als Jok zijn advies nodig had. De aanpak van Kees zorgde voor een hoge productiviteit en vele gezamenlijke publicaties.

Op de afdeling had Jok niet echt sparring partners. Omdat Kees Vuik al een expert was op het onderzoeksgebied, kon hij met zijn begeleiding en hulp gemakkelijk in het wereldje rollen. Zijn sparring partners kwamen meer van andere instituten die soortgelijke methoden gebruiken. Met hen heeft Jok vele tweelaags gepreconditioneerde Krylovmethoden vergeleken en relaties tussen de diverse methoden gelegd. Iets wat nog vrij weinig werd gedaan, vanwege de complexiteit van de methoden en het feit dat ze uit diverse werelden komen, elk met zijn eigen notaties en interpretaties.

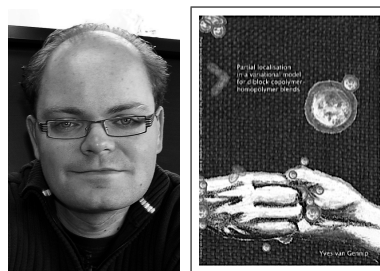
Jok is twee keer op werkbezoek geweest naar de TU Berlin om te werken met professor Reinhard Nabben, die eerder al samenwerkte met Kees Vuik. Beide bezoeken waren zeer vruchtbaar, getuige de diverse papers die ze samen hebben geschreven. Jok heeft bovendien samengewerkt met Scott MacLachlan, voorheen postdoc aan de TU Delft en nu assistent professor aan Tufts University in de VS. Ook met deze expert in multigrid methodes heeft Jok veel vruchtbaar onderzoek verricht. Het reizen vond Jok geweldig en het samenwerken met toponderzoekers uitdagend. Sterker nog: "Deze samenwerkingen met topmensen hebben wezenlijk bijgedragen tot hoe en wie ik nu ben. Ik voel me dankzij hen een volwassen wetenschapper."

Het publiceren van je resultaten geeft veel voldoening volgens Jok, maar raakt tegelijkertijd aan het voor hem moeilijkste aspect van het aio-schap. Het gepubliceerd krijgen van wetenschappelijke artikelen viel hem tegen: Het uitwerken van een wiskundig idee vergde natuurlijk tijd, maar om het daarna door het reviewproces heen te krijgen bleek nog lastiger, omdat de reviewers vaak uit verschillende disciplines kwamen en daardoor allemaal anders tegen zaken aankeken.

Iets totaal anders

Ter afsluiting van deze terugblik citeert Jok de volgens hemzelf mooiste stelling bij zijn proefschrift: "De vliegtaks en verpakkingstaks zijn recente vormen van milieu- en taalterreur." Taks is formeel geen Nederlands woord. De twee belastingen hebben als doel om het milieu een handje te helpen, maar hij, en vele mensen met hem, zijn van mening dat de twee maatregelen juist slecht zijn voor het milieu en alleen ingevoerd zijn om de staatskas te spekken. Als lezers hierover met hem in discussie willen, moeten ze niet naar de TU Delft gaan, want na zijn promotie is Jok iets totaal anders gaan doen. Hij is vanaf 1 november analist bij Deloitte op de afdeling pensioenen en actuaariaat.

Een hele andere richting in een nieuwe omgeving, maar dat is ook precies wat hij wilde. Hij wil graag bijleren in andere disciplines en diverse vaardigheden verder ontwikkelen.



Partial localisation in a variational model for diblock copolymer-homopolymer blends

Yves van Gennip

Yves van Gennip heeft een groot deel van zijn aio-tijd de agenda- en nieuwsrubrieken van het Nieuw Archief voor Wiskunde onder zijn hoede gehad. Op 8 oktober 2008 promoveerde hij bij Mark A. Peletier aan de Technische Universiteit Eindhoven. Hij is inmiddels begonnen aan een nieuwe uitdaging: hij werkt als postdoc bij Rustum Choksi aan de Simon Fraser University in Burnaby (Vancouver) in Canada. Vlak voor de verdediging van zijn proefschrift *Partial localisation in a variational model for diblock copolymer-homopolymer blends* blikte hij terug op de afgelopen vier jaar.

Om een indruk te geven van de inhoud van zijn proefschrift, plaatst Yves zijn onderzoek eerst in een wat bredere context: Overall in de natuur zien we patronen, denk bijvoorbeeld aan de kleurpatronen op vissen of de strepen in het zand van woestijnen. Door patronen te modelleren en de modellen vervolgens wiskundig te onderzoeken, kunnen we inzicht krijgen in de fysica achter de patroonvorming. Zijn er overeenkomsten of juist verschillen tussen de uiteenlopende patronen die we tegenkomen? Tegelijkertijd leren we op deze manier ook meer over het gedrag van de wiskundige systemen: wat is er nodig om bepaalde structuren te beschrijven, wat voor een gedrag vertoont een bepaald systeem? In het proefschrift van Yves stond een specifiek voorbeeld van patroonformatie centraal. Hij heeft een model onderzocht voor zogenoemde diblockcopolymeer-homopolymeermengsels, mengsels van polymeren die in experimenten bijzondere structuren laten zien: partieel gelokaliseerde patronen. Zulke structuren zijn klein in sommige richtingen en uitgestrekt in andere; denk aan krommen of oppervlakken in drie dimensies.

Diblockcopolymeren en een variationeel model

Een polymeer is een lang kettingachtig molecuul, een keten van kleinere groepjes atomen. Deze atoomgroepen worden monomeren genoemd. Een diblockcopolymeermolecuul heeft een speciale opbouw. Een gedeelte van het molecuul bevat monomeren van een soort, zeg soort U , en de rest van het molecuul bestaat uit monomeren van een andere soort, zeg soort V . Deze beide soorten monomeer stoten elkaar af, maar omdat ze met elkaar verbonden zijn in een diblockcopolymeermolecuul is er een grens aan de afstand die ze uit elkaar kunnen gaan. De interactie tussen deze twee invloeden leidt tot patroonvorming in diblockcopolymeersmeltels. In het door Yves bestudeerde systeem is ook nog een homopolymeer aanwezig, waarin de moleculen uit slechts één soort monomeer zijn opgebouwd.

Het gebruikte model om het systeem te beschrijven is een variatoneel model: er is een functionaal gegeven die aan elke structuur een energiewaarde toekent. De structuren die deze energie minimaliseren, zijn precies de patronen die volgens het model in het systeem aange troffen kunnen worden. De wiskundige moeilijkheid is nu om erachter te komen hoe deze minimaliserende structuren eruit zien.

Meer concreet ziet het eruit als volgt. $\Omega \subset \mathbf{R}^N$ is het fysieke domein voor het mengsel. Twee functies $u, v : \Omega \rightarrow \{0, 1\}$ beschrijven de volumefracties van U- en V-monomeren. Aangenomen wordt, dat de gebieden in Ω waar zich geen U- of V-monomeren bevinden gevuld zijn met het homopolymeer, dat daarom een volumefractie $1 - u - v$ heeft. De energiefunctiaal heeft de volgende vorm:

$$\mathcal{F}(u, v) = \begin{cases} d_{u0}\mathcal{H}^{N-1}(S_{u0}) + d_{v0}\mathcal{H}^{N-1}(S_{v0}) \\ \quad + d_{uv}\mathcal{H}^{N-1}(S_{uv}) + \|u - v\|_{H^{-1}}^2 & \text{als } (u, v) \in \mathcal{K}, \\ \infty & \text{elders.} \end{cases}$$

Hierin wordt de verzameling van toegestane functies waarop de functionaal eindig is gegeven door

$$\mathcal{K} := \left\{ \begin{array}{l} (u, v) \in (BV(\Omega))^2 : u(x), v(x) \in \{0, 1\} \text{ bijna overal,} \\ uv = 0 \text{ bijna overal, en } \int_{\Omega} u = \int_{\Omega} v \end{array} \right.$$

met BV de verzameling van functies met *bounded variation*. Verder is d_{u0} een niet-negatieve parameter voor de sterkte van de afstoting tussen U-monomeren en homopolymeren, en geven d_{v0} en d_{uv} de sterkte van de afstoting tussen de andere bestanddelen aan, is \mathcal{H}^{N-1} de $(N - 1)$ -dimensionale Hausdorffmaat en zijn S_{u0}, S_{v0}, S_{uv} de interfaces tussen de verschillende monomeergebieden:

$$\begin{aligned} S_{u0} &= \partial^* \text{supp } u \setminus \partial^* \text{supp } v, \\ S_{v0} &= \partial^* \text{supp } v \setminus \partial^* \text{supp } u, \\ S_{uv} &= \partial^* \text{supp } u \cap \partial^* \text{supp } v. \end{aligned}$$

∂^* is de essentiële rand van een verzameling (voor verzamelingen met een gladde rand is deze gelijk aan de rand).

De term $\|u - v\|_{H^{-1}}^2$ bestraft het ruimtelijk scheiden van U- en V-monomeren, zij het in een zwakke vorm. In de continuümopzet waarvoor in dit model is gekozen zijn afzonderlijke monomeermoleculen namelijk niet meer te onderscheiden, slechts $\text{supp } u$ en $\text{supp } v$ zijn terug te vinden. Genoemde term preferert sterke menging van deze twee verzamelingen, of in andere woorden, snelle oscillaties van de functie $u - v$ tussen -1 en 1 .

Slimme wiskundige constructies

Voor een beetje gecompliceerde energiefunctiaal is het doorgaans niet direct in te zien wat de minimaliserende structuren zijn, maar in het geval van Yves is dit in één dimensie wel volledig gelukt. Zijn favoriete resultaten betreffen echter de hogere dimensies. Er zijn in dat geval slimme wiskundige constructies nodig om iets over de minimaliserende structuren te kunnen zeggen, zoals bijvoorbeeld Γ -convergentie. Dit is een speciaal type convergentie voor functionalen met de mooie eigenschap dat minimaliserende structuren van de functionalen in de limietrij convergeren naar een minimaliserende structuur van de Γ -limiet van de functionalen. Met behulp van deze techniek wordt in Yves' proefschrift een asymptotische ontwikkeling bewezen voor een functionaal die sterk lijkt op de energiefunctiaal in het model voor

diblokopolymeer-homopolymeermengsels ("Helaas niet precies dezelfde", aldus Yves). Deze ontwikkeling laat zien dat die functionaal, die 'leeft op' structuren die rond een kromme gelokaliseerd zijn, energie toekent aan bepaalde meetkundige eigenschappen van de kromme. Als de kromme gebogen is, wordt dit bestraft door de energiefunctiaal, maar op een 'lager niveau' dan open eindjes bestraft worden. Dit betekent dat een gesloten kromme lagere energie heeft dan een open kromme. Op dezelfde manier is ook te zien dat open eindjes op hun beurt op een lager niveau gepenaliseerd worden dan de lengte van de kromme. De kromme breekt dus liever dan dat deze opgerekt wordt.

Hoewel deze resultaten niet voor de originele energiefunctiaal zijn, geven ze toch een goed inzicht in het gedrag dat partieel gelokaliseerde structuren kunnen vertonen. En Yves vindt het mooi dat deze asymptotische ontwikkeling hard gemaakt kan worden met behulp van Γ -convergentie.

Lekker bezig zijn met wiskunde

Ondanks de goede afloop heeft Yves zich niet altijd zeker gevoeld over zijn aio-schap. In het begin wist hij vaak niet zo goed of hij wel op zijn plaats was in het wereldje waar hij terechtgekomen was en stelde hij zich vragen die menig aio of gepromoveerde zal herkennen en die, aldus Yves, bij het aio-schap lijken te horen: was hij wel goed genoeg, waar deed hij het allemaal voor? Maar naarmate hij wat meer in zijn rol groeide en meer resultaten geboekt had, ebde dat allemaal weg. Het leven als aio is hem uiteindelijk prima bevallen. Hij had veel vrijheid, maar toch ook intensief contact met Mark, zijn promotor. Hij was lekker met wiskunde bezig en beleefde vele mooie momenten. Yves had bovendien een groep collega-aio's waar in de loop der jaren een mooie vriendschap tussen ontstaan is en kan dan ook zonder overdrijven stellen dat hij vier mooie jaren gehad heeft.

Gevraagd naar een specifiek mooi moment noemt hij zijn reizen, en dan eentje in het bijzonder. Hij heeft het geluk gehad conferenties en collega's te kunnen bezoeken op uiteenlopende plekken in Europa en de VS en zelfs een keer in Tokio. Dat laatste was een heel speciale ervaring. Hij was pas een jaar aio, was nog op zoek waar hij precies thuishoorde en waar hij mee bezig was en toch mocht hij al in z'n eentje op weg naar Japan. En hoewel hij er nog geen week geweest is en een groot deel van die tijd in beslag genomen werd door de conferentie, heeft hij het als een bijzonder bezoek ervaren.

Zuiver of toegepast?

Wordt aan menige (wiskundige) lunchtafel weleens over Ajax en PSV gebakkeleid, bij Yves hebben deze clubs zelfs zijn stellingen gehaald: "Het 'verschil' tussen 'zuivere' en 'toegepaste' wiskunde is een beetje zoals het verschil tussen PSV en Ajax. Beide spelen hetzelfde spelletje; een spelletje dat veel minder interessant zou zijn als een van beide van het toneel zou verdwijnen. Desondanks is er een beeldbepalende groep mensen die tegen alle rationele overwegingen in blijft volhouden dat er fundamentele verschillen bestaan die het zelfs waard zijn om sociale verhoudingen voor te ontwrichten. Ik wil overigens geenszins suggereren dat een van beide takken van wiskunde al jarenlang geen aansprekende resultaten meer geboekt zou hebben en alleen maar beoefend zou worden door mensen die de naam hebben arrogant te zijn." Voor zijn promotie kreeg hij al veel reacties op deze stelling: hij vindt bovendien dat de stelling mooi aansluit bij het voorwoord van Wil Schilders uit het septembernummer 2008 van NAW. Deze stelling kan zeker ook als stof voor een goede lunchtafel discussie dienen! ←