op95

ex perimentele wiskunde

michiel hazewinkel

CWI

Experimentele Wiskunde

Michiel Hazewinkel

Mathematisch Centrum

Niet al te korte samenvatting

1. Inleiding

Onderwerp van deze voordracht is experimentele wiskunde en daaronder versta ik het gebruik van een computer als een wiskundig laboratorium waarin experimenten gedaan kunnen worden die intuitie kunnen genereren voor het begrijpen van (wiskundige) problemen en waaruit ideeën opgedaan kunnen worden voor vermoedens. Of experimenten die kunnen suggereren waar naar een tegenvoorbeeld gezocht zou kunnen worden. Of experimenten ter illustratie en modificatie van ideeën om een bepaald vermoeden te bewijzen, en berekeningen om zekere (halve) vermoedens te testen of te verfijnen. Kortom een tak van wiskunde die t.o.v. de meer traditionele wiskunde ongeveer zo staat als experimentele natuurkunde t.o.v. theoretische.

Dat wil zeggen dat ik het niet in eerste instantie zal hebben over "scientific computing" tenminste als die activiteit gericht is op het krijgen van numerieke antwoorden op problemen die in principe opgelost en begrepen zijn maar waarvan het uitvoeren van de oplossingsmethode de menselijke mogelijkheden te boven gaat. De scheidslijn tussen scientific computing en experimentele wiskunde is trouwens niet al te scherp te trekken. Het zuivere bestaan van enorme rekencapaciteit heeft zeker enorme invloed op de soort theoretische problemen waarover nagedacht wordt en zekere research gebieden met een volwaardige theoretische component zoals bijv. semiparametrische statistiek, twee dimensionale statistiek, en computer tomografie waren zonder dit gegeven van grote rekencapaciteit waarschijnlijk niet of nauwelijks tot leven gekomen [17,30,39]. Het is overigens interessant te constateren dat het theoretische probleem waar computer tomografie op berust (inversie van de Radon transformatie) al in 1917 werd opgelost [38] maar dat het toepassen hiervan weer hele rissen nieuwe theoretische problemen deed onstaan [30].

Ik zal ook niet spreken over "computer assisted proofs" (zoals van het vierkleuren probleem) en zeker niet over de philosophische implicaties daarvan [15, blz. 380-386].

Ik zal spreken als gebruiker en niet als doeër van experimentele wiskunde en zal mij concentreren op een aantal voorbeelden waarbij het doen van experimenten op een computer geleid heeft tot nieuwe (soms verrassende) inzichten (soms in onderwerpen waar niets interessants verwacht werd) en zo ook aanleiding heeft gegeven tot nieuwe begrippen, oplossingstechnieken en hele nieuwe onderzoeksgebieden. De voorbeelden waarover ik kort, anecdotisch en met weglating van vrijwel alle echte wiskunde zal proberen te vertellen zijn hieronder kort beschreven in de secties 3,4 en 5. Deze voorbeelden zijn respectievelijk:

- Het harde hexagon model uit de rooster statistische mechanica
- Chaos en universaliteit bij het itereren van afbeeldingen
- Integreerbare systemen en de soliton revolutie.

2. Twee contrasterende meningen

Hier zijn twee contrasterende opinies:

"As I see it, within another generation, the mainstream of mathematics will not be analysis, number theory and topology but rather numerical analysis, operations research, and statistics. ... I am not suggesting that the pure areas of mathematics or for that matter the classical topics in applied mathematics such as transform methods, partial differential equations and approximation theory, will disappear. Instead, like Newtonian mechanics, they may move permanently from centre stage in mathematics departments."

J.C. Frauenthal [23]

Aan de andere kant, in [50] zegt N. Zabusky:

"... by the judicious use of computers we can penetrate into new areas and discover linkages to diverse areas of mathematics unforeseen by our forebears. With insight obtained from numerous solutions, often displayed naturally by graphs and cinemas, we may be liberated from the prejudices of our conservative and sometimes misguided mathematical intuitions."

"Almost everyone using computers has experienced instances where computational results have sparked new insights. The range covered is large: from uncovering mistakes in formal derivations or calculations to suggestions for combinations of parameters with which to make asymptotic expansions and thereby obtain equations which are analytically tractable; and finally to shining the light of inspiration into areas which have been thought devoid of possible new concepts or new fundamental truths."

"Although several pioneering steps have been taken, we are just at the beginning of a mind augmenting revolution that inexpensive and robust computing will allow the prepared investigator."

Dit is geheel volgens de verwachtingen van von Neumann die (in 1946 sprekend!) rekende op de computer om iets te doen aan:

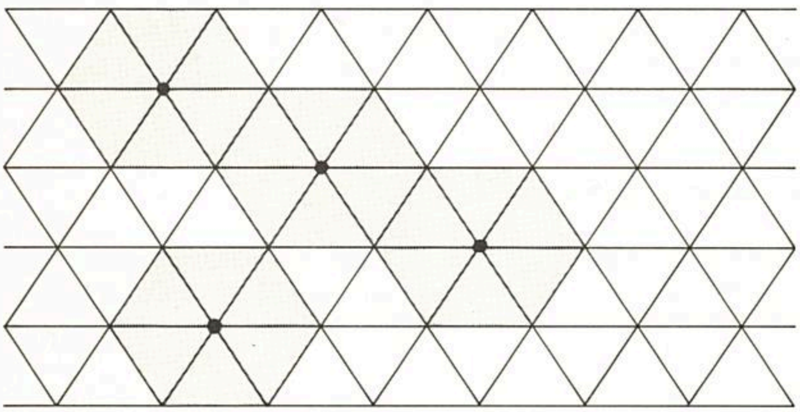
"The advance of analysis is, at this moment, stagnant along the entire front of nonlinear problems"

"... we conclude by remarking that really efficient high-speed computing devices may, in the field of nonlinear partial differential equations as well as in many other fields which are now difficult or entirely denied of access, provide us with heuristic hints which are needed in all parts of mathematics for genuine progress ... . This should lead ultimately to important analytical advances."

Zabusky loc.cit. spreekt in dit verband van "computational synergetics and mathematical innovations" en ik hoop dat de voorbeelden die ik aan de hand van plaatjes en semi-historische opmerkingen zal proberen te beschrijven dit zullen illustreren.

3. Het harde hexagon model

Bekijk een driehoekig rooster



met N roosterpunten en zij $g(p,N)$ het aantal manieren om p deeltjes over de roosterpunten te verdelen zodat geen twee op dezelfde of buurpunten liggen. Zij

$$Z(z,N) = \sum_{p=0}^{N/3} z^p g(p,N) = 1 + Nz + \frac{N(N-7)}{2} z^2 + \cdots$$

Het gaat er nu om $Z(z,N)$ te berekenen of (makkelijker en) beter

$$\lim_{N\to\infty}(Z(z,N))^{1/N} = \kappa(z).$$

Computer berekeningen suggereerden zekere waarden voor zekere belangrijke getallen met betrekking tot $\kappa(z)$ zoals de critieke punten $z_c = 11.12 \pm 0.1$, $z_n = -0.0900 \pm 0.0003$ zodat $z_c + z_n = 10.96 \pm 0.15$, $z_c z_n = -0.995 \pm 0.014$, suggererend dat dit product en deze som misschien gehele getallen zouden zijn en waarmee dan dus z_c en z_n exact bepaald zouden zijn. Ook $ln\ \kappa(1) = 0.3333 \pm 0.0001$. Misschien $ln\ \kappa(1) = 1/3$? Eén van deze twee vermoedens bleek waar en één onjuist, maar belangrijker, voordat de rook was opgetrokken liep R.J. Baxter (via computer berekeningen van reeksen) aan tegen het feit dat identiteiten zoals

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{q^{n^2}}{(1-q)(1-q^2)...(1-q^n)} = \prod_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(1-q^{5n-4})(1-q^{5n-1})}$$

belangrijk waren voor het beschrijven van $\kappa(z)$ en geassocieerde statistisch mechanisch belangrijke grootheden. (Rogers-Ramanujan identiteiten) [6,7,8]. Er bleken 4 regimes te zijn in het harde hexagon model. Voor drie ervan waren de bekende identiteiten voldoende; voor het vierde kon Baxter vermoeden en per computer tot circa graad 90 verifiëren welke identiteiten hij nodig had. Deze nieuwe R.R. identiteiten werden later ook door G.E. Andrews bewezen [3]. Inmiddels hebben Baxter en Andrews de zaak gegeneraliseerd tot het geval van mogelijke toestanden per roosterpunt, het magische getal 5 hierboven wordt dan $2k+1$.

4. Chaos en universaliteit

We bekijken een afbeelding van het interval [0,1] op zichzelf zoals bijvoorbeeld gegeven door $x \to 1 - \mu x^2$ en zijn geinteresseerd in het limiet gedrag als deze afbeelding $N\times$ geitereerd wordt en hoe dit limiet gedrag verandert als μ varieert.

Voordat ik iets zeg over de phenomenologie citeer ik O.E. Lanford over de geschiedenis van dit onderwerp [32], adus de opinie van Zabusky en von Neumann stavend.

"The methods used to study smooth transformations of intervals are by and large elementary and the theory could have been developed long ago *if anyone had suspected that there was anything worth studying.* In actual fact, the main phenomena were discovered through numerical experimentation and the theory has been developed to account for the observations. In this respect, computers have played a crucial role in its development."

O.E. Lanford [32]

Hier is iets van de phenomenologie. Voor $\mu < 0.75$ is er een uniek attractief punt, dan ontstaat een attractief paar ($\mu < 1.25$), dan komt een attractieve periodieke baan van orde 4 die weer overgaat in een periodieke baan van periode 8 (bij $\mu = 1.368...$) etc.. Laat μ_n, $n = 1,2,3,...$ de zo verkregen reeks parameter waarden zijn ($\mu_3 = 1.368...$ dus). Dan geldt $\mu_\infty = 1.401...$ en

$$\mu_\infty - \mu_n \sim \text{const.}(4.6692...)^{-n}.$$

Dit getal 4.6692... blijkt nu universeel te zijn en geldt voor allerlei afbeeldingen gegeven door heel verschillende formules. (Ontdekking van Feigenbaum [19] en Coullet-Tresser [14]). Dit is inmiddels wiskundig begrepen en ook andere universele aspecten van iteratieve afbeeldingen, maar lang niet alle. Bekijk bijvoorbeeld de volgorde waarin (als μ groeit) diverse attractieve periodieke banen van orde n tevoorschijn komen. Met weglating van alle $n \geqslant 8$ is dit rijtje

$$1,2,4,6,7,5,7,3,6,7,5,7,6,7,4,7,6,7,5,7,6,7$$

en dit rijtje lijkt ook universeel te zijn en te gelden voor vele families van afbeeldingen [34]. Dit is nog onverklaard en onbegrepen.

Er is zeker ook universeel gedrag voor zowel conservatieve als dissipatieve afbeeldingen van een stuk vlak in zich zelf waarvoor de onderliggende verklaringen nog ontbreken [11,20,25,48,36].

5. Integreerbare systemen en de soliton revolutie

Natuurlijk is het doen van wiskundige experimenten (oftewel het uitrekenen van voorbeelden) niet echt nieuw. Euler en Gauss waren beroemd en berucht om de enorme energie die zij besteedden aan het uitrekenen van tabellen. Philosophisch is er misschien dus alleen maar een kwantitatief verschil gekomen met de komst van de computer. Maar wel een groot verschil.

Misschien wel het eerste mathematische experiment werd al gedaan toen de copie van de MANIAC in Los Alamos nog nauwelijks klaar was en Fermi, Ulam en Pasta bewust zochten naar een probleem dat inzicht in "long-range prediction" en "long-time behaviour" vereiste en (dus) te groot was voor berekeningen met mechanische hand-machines. Een elastische snaar met beide einden vast met een kleine extra niet lineaire term. En dit leverde meteen een verrassing op. Het plan was te zien met welke snelheid de energie in de basis trilling modus zich zou verspreiden over de hogere harmonischen totdat een "mess" zou zijn ontstaan met energie in hogere en hogere harmonischen. In plaats daarvan keerde de "snaar" na honderden trillingen steeds weer terug naar zijn oorspronkelijke sinus vorm [47]. Dit vroeg om een verklaring en die werd ook gevonden en dat was het begin van de "soliton revolutie" en het multidisciplinaire gebied van "(volledig) integreerbare Hamiltoniaanse systemen."

Een voorbeeld van deze zijn de zogenaamde Toda lattices en het is interessant op te merken dat de volledige integreerbaarheid hiervan eerst numeriek werd aangetoond [13,22] voordat die analytisch werd bewezen. Het is overigens nog steeds in dit gebied veelal zo dat als een systeem er van verdacht wordt wellicht integreerbaar te zijn dat dan de eerste stap is dit (met hoge energie) op de machine te testen. Aan de hand van plaatjes zullen we iets zien van hoe dat gaat.

6. Meer open vragen komende uit de experimentele wiskunde

Boven "behandelde" drie voorbeelden zijn natuurlijk maar een losse greep. Elf andere interessante computer experimenten staan beschreven in [26] en zowel dit zeer interessante boek als ikzelf zijn geheel voorbij gegaan aan de rol die computer experimenten speelden en spelen in bijvoorbeeld getallentheorie en (arithmetische) algebraïsche meetkunde waar zij zeer belangrijk zijn.

Hier zijn nog wel open problemen gesuggereerd door computer experimenten:

— Het begrijpen van het bifurcaties-plaatje en phase-diagram van de Josephson junction (een vergelijking die de rol van de v.d.Pol vergelijking lijkt te gaan overnemen als *het* inspirerende exacte voorbeeld) [44,9,41,40].

— Het verschijnsel "semi-stabiele toestanden". Bij numeriek simulatiewerk van evolutie vergelijkingen, zowel stochastisch als deterministisch, lijkt het regelmatig voor te komen dat een begintoestand snel evolueert naar een zeer stabiel lijkende toestand die het zeer lang volhoudt (soms langer dan gerekend kan worden) zonder een stabiele limiet toestand te zijn [16,18,31]. Hoe dit mathematisch te beschrijven en begrijpen?

— Als "regel" in Hamiltoniaanse systemen wordt het gedrag chaotischer als de energie parameter hoger wordt. (Numeriek testen van "integreerbaarheid" van een systeem wordt dan ook standaard bij hoge energie gedaan.) Een stelling van dit type ontbreekt. Uitzondering zijn natuurlijk systemen die naarmate E hoger wordt in bijna ontkoppelde subsystemen uit elkaar vallen. Er zijn echter ook voorbeelden waarbij dit niet het geval lijkt te zijn en waar toch bij hogere energie regelmatig gedrag terugkeert [1,2].

— Door kleine parameter wijzigingen kan men proberen het semi-regelmatig gedrag van een dynamisch systeem in een bepaald gebied te verstoren ("Destruction of KAM tori"). Dit is voor conservatieve systemen van dezelfde energie niet makkelijk zonder dat ergens anders weer meer regelmatig gedrag te voorschijn komt. Dat wil zeggen er is numerieke evidentie voor zoiets als behoud (of continuïteit) van "globale hoeveelheid regelmatig gedrag" [11,20,25,48].

— In vele physische systemen komt niet alleen witte ruis voor maar ook iets wat bekend staat als 1/f ruis. Er zijn numerieke aanwijzigingen dat zoiets gemodelleerd zou kunnen worden middels chaos, i.e. vreemde attractoren en deterministisch chaotisch gedrag in tegenstelling tot stochastisch chaotisch gedrag [42].

Het schijnt dat op dit moment meer experimenteel wiskundige ontdekkingen gedaan worden (vooral door physici en electronici) dan er wiskundig begripsmatig verwerkt kunnen worden.

Referenties

[1] M.K. Ali & R.L. Somorjai, *Reappearance of ordered motion in non-integrable Hamiltonian systems,* Prog. Theor. Physics **68**, 6 (1982) 1854-1863.

[2] M.K. Ali & R.L. Somorjai, *Reappearance of ordered motion in some non-integrable Hamiltonian systems,* Physica 1D (1980) 383-390.

[3] G.E. Andrews, *Rogers-Ramanujan identities and the hard hexagon model,* ... Nat. Acad. USA.

[4] K.J. Astrom, *Computer aided modelling, analysis and design of control systems — a perspective,* Control Systems Magazine 1983.

[6] R.J. Baxter, *Talk on "Hard hexagon model" at Kings College,* London, July 1980 (transparencies + cassette tape).

[7] R.J. Baxter, *Rogers-Ramanujan identities in the hard hexagon model,* J. of Statistical Phys. **26** (1981) 427-452.

[8] R.J. Baxter, *The hard hexagon model in lattice statistics and the Rogers-Ramanujan identities,* (handwritten notes, 5 Nov. 1979).

[9] V.N. Belykh, N.F. Pederson & O.H. Soerensen, *Shunted-Josephson-junction model I, II,* Phys. Rev. B **16**, 11 (1977) 4853-4859; ibid 4860-4871.

[10] G. Birkhoff, *Numerical fluid dynamics,* SIAM Rev. **25** (1983) 1-34.

[11] T.C. Bountis, *Period doubling bifurcations and universality in conservative systems,* Physica 3D (1981) 577-589.

[13] G. Casati & J. Ford, Phys. Rev. A **12**, 4 (1975) 1702-

[14] P. Coullet & J. Tresser, *Itérations d'endomorphismes et groupe de rénormalisation,* C.R. Acad. Sci., Paris **287** (1978) 577-580.

[15] Ph.J. Davis & R. Hersh, *The mathematical experience,* Harvester Pr., 1981.

[16] A. De Palma, *Thesis,* Univ. Libre de Bruxelles, 1980.

[17] B. Efron, *Computers and the theory of statistics: thinking the unthinkable,* SIAM Rev. **21** (1979) 460-480. (How the availability of high-speed computers changes the statistical tests (and theory) one is prepared to use; thus creating new areas for (also) theoretical investigations (nonparametric statistics or better "semi-parametric statistics")).

[18] R. Feeney, S.L. Schmidt, P. Stickholm, J. Chadam & P. Oitoleva, *Periodic precipitation and coarsing solitons,* Applications of the particle growth model.

[19] M. Feigenbaum, *Quantitative universality for a class of nonlinear transformations,* J. Stat. Physics **19** (1978) 25-52.

[20] M.J. Feigenbaum, L.P. Kadanoff & S.J. Shenker, *Quasi periodicity in dissipative systems:a renormalization group analysis,* Physica 5D (1982) 370-386.

[21] J. Ford, *How random is a coin toss,* Physics Today, April 1983, 40-47. (On the definition of random versus determinate complexity theory, à la Chaitin, Martin-Löf and the question of infinite precision.)

[22] J. Ford, S. Stoddard & J. Turner, Progr. Theor. Physics **50** (1973) 1547-

[23] J.C. Frauenthal, *Change in applied mathematics is revolutionary,* SIAM News, April 1980.

[25] J.M. Greene, R.S. MacKay, F. Vivaldi & M.J. Feigenbaum, *Universal behaviour in families of area preserving maps,* Physica 3D (1981) 468-486.

[26] U. Grenander, *Mathematical experiments on the computer,* Acad. Pr., 1982.

[27] J. Guckenheimer, *Noise in chaotic systems,* Nature **298** (1982) 358-361.

[30] IEEE, Proc. IEEE March 1983, Special issue on computerized tomography.

[31] J.F. Kaashoek, Scriptie EUR 1983.

[32] O.E. Lanford, *Smooth transformations of intervals,* Sém. Bourbaki 1980/81, Exp 563, Lect. Notes Math. **901** (1981) 36-54.

[34] M. Metropolis, M.L. Stein & P.R. Stein, *On finite limit sets for transformations of the unit interval,* J. Comb. Theory **15** (1973) 25-44.

[36] H.-O. Peitgen, *Phase transitions on the homoclinic regime of area preserving diffeomorphisms,* Forschungsschwerpunkt Dyn. Syst., Bremen, Rep. 68, 1982.

[38] J. Radon, *Uber die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwert langs gewisser Mannigfaltichkeiten,* Sächsische Berichte Akad. der Wiss. **69** (1917) 262-277.

[39] B.D. Ripley, *Spatial statistics,* Wiley, 1981.

[40] J.A. Sanders, *The (driven) Josephson equation: an exercise in asymptotics,* Rapport 220, 1982, Math. Sem., Vrije Univ. A'dam.

[41] W.A. Schlup, *I-V characteristics and stationary dynamics of a Josephson-junction including the interference term in the current phase relation,* J. Phys. C. Solid State Phys., Vol **17** (1974) 736-748.

[42] R. Shaw, *Strange attractors, chaotic behaviour and information flow,* Z. Naturforsch. **36**a (1981) 80-112.

[44] F. Sullivan, D. Kahaner, H.A. Fowler & J. Knapp-Cordes, *Wave form simulations for Josephson junction circuits used for noise thermometry,* Nat. Bur. of Standards, Report NBSIR 83-2643, 1983.

[47] S.M. Ulam, *Adventures of a mathematician,* Scribner, 1976.

[48] M. Widom & L.P. Kadanoff, *Renormalization analysis of bifurcations in area preserving maps,* Physica 5D (1982) 287-292.

[50] N. Zabusky, *Computational synergetics and mathematical innovation,* J. Comp. Phys. **43** (1981) 195-249.

[51] N. Zabusky, *Letter to Physics Today,* Febr. 1983, 95-96.