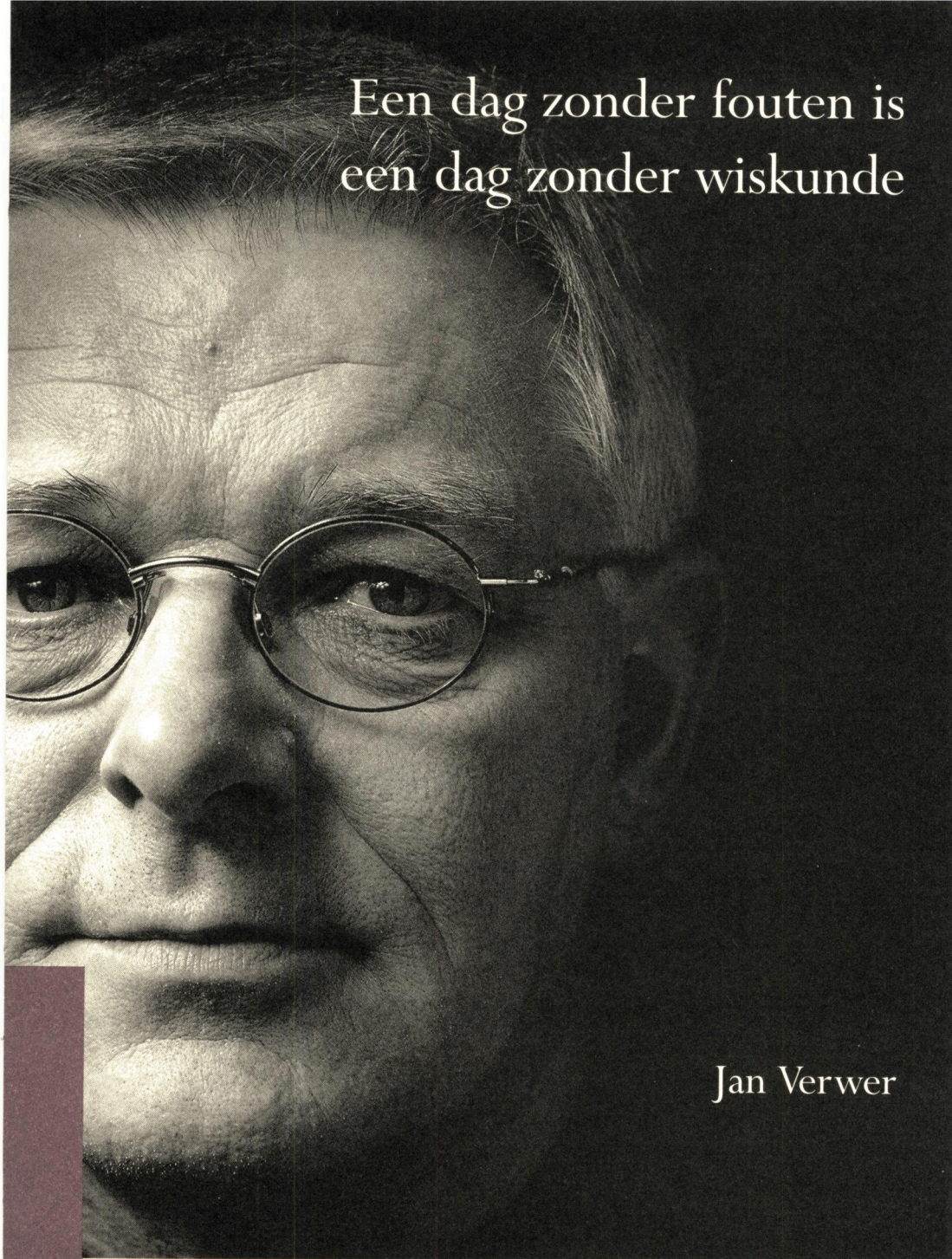


Een dag zonder fouten is
een dag zonder wiskunde



Jan Verwer



FACULTEIT DER NATUURWETENSCHAPPEN, WISKUNDE EN INFORMATICA

Een dag zonder fouten is een dag
zonder wiskunde

Vossiuspers UvA

Deze uitgave is tot stand gekomen onder auspiciën van de Universiteit van Amsterdam.

Omslag: Colorescan, Voorhout

Opmaak: JAPES, Amsterdam

Foto omslag: Carmen Freudenthal, Amsterdam

ISBN 90 5629 226 9

©Vossiuspers UvA, Amsterdam, 2002

Alle rechten voorbehouden. Niets uit deze uitgave mag worden verveelvoudigd, opgeslagen in een geautomatiseerd gegevensbestand, of openbaar gemaakt, in enige vorm of op enige wijze, hetzij elektronisch, mechanisch, door fotokopieën, opnamen of enige andere manier, zonder voorafgaande schriftelijke toestemming van de uitgever.

Voorzover het maken van kopieën uit deze uitgave is toegestaan op grond van artikel 16B Auteurswet 1912 ⁰ het Besluit van 20 juni 1974, St.b. 351, zoals gewijzigd bij het Besluit van 23 augustus 1985, St.b. 471 en artikel 17 Auteurswet 1912, dient men de daarvoor wettelijk verschuldigde vergoedingen te voldoen aan de Stichting Reprorecht (Postbus 882, 1180 AW Amstelveen). Voor het overnemen van gedeelte(n) uit deze uitgave in bloemlezingen, readers en andere compilatiewerken (artikel 16 Auteurswet 1912) dient men zich tot de uitgever te wenden.

Een dag zonder fouten is een dag zonder wiskunde

Rede

Uitgesproken ter gelegenheid van de aanvaarding
van het ambt van bijzonder hoogleraar
Numerieke Wiskunde en Informatica aan de Universiteit van Amsterdam
op vrijdag 7 december 2001

door

Jan Verwer



VOSSIUSPERS UvA

*Mijnheer de Rector,
Zeer geacht Bestuur en Curatorium van de
Stichting voor Hoger Onderwijs in de Toegepaste Wiskunde,
Zeer gewaardeerde toehoorders,*

Voor U staat de zesde bijzonder hoogleraar benoemd namens de *Stichting voor Hoger Onderwijs in de Toegepaste Wiskunde*. Deze stichting is opgericht in 1948 en stelt zich ten doel om aan de Universiteit van Amsterdam, of aan een andere Nederlandse universiteit, een bijzondere leerstoel voor hoger onderwijs in de toegepaste wiskunde te vestigen. Mijn voorgangers waren Van der Waerden, Van Wijngaarden, Lauwerier, Kruseman Aretz en Van der Houwen. Voor velen van U bekende en klinkende namen. Ik voel me dan ook zeer vereerd dat ik de zesde in de rij ben.

De numerieke wiskunde en het wetenschappelijk rekenen

Mijn leerstoel is gevestigd bij het Korteweg-De Vries instituut voor Wiskunde.¹ Hier concentreert zich al het onderwijs en onderzoek in de wiskunde van de Universiteit van Amsterdam. Mijn officiële leeropdracht is de *Numerieke Wiskunde en Informatica*. De Stichting zal het me niet euvel duiden, dat ik me zal beperken tot de *Numerieke Wiskunde*. Van de moderne informatica heb ik weinig tot geen verstand en het lijkt me dus beter dat over te laten aan collega's die meer deskundig zijn op dit gebied. Er is een tijd geweest dat de numerieke wiskunde en de informatica zeer dicht bij elkaar lagen, namelijk in de tijd van de eerste programmeerbare computers, zo ongeveer vanaf de oorlog tot de jaren zestig. Toen is het *Wetenschappelijk Rekenen* ontstaan, het uitvoeren van wiskundige berekeningen met behulp van computers. In die tijd bestond er niet zo'n duidelijke scheiding tussen de softwarekant en de wiskundekant van het wetenschappelijk rekenen. In een latere periode zijn deze

twee kanten zich met hoge snelheid zelfstandig gaan ontwikkelen, de softwarekant tot het vakgebied wat we nu de informatica noemen en de wiskundekant tot de numerieke wiskunde.

Een precieze scheidslijn in deze ontwikkeling is moeilijk te trekken. De bekende Van Wijngaarden, onze informaticus *en* numericus van het eerste uur, die dezelfde leerstoel bekleedde van 1 september 1952 tot 1 september 1958, had als leeropdracht *Numerieke Wiskunde en de Leer der Rekenautomaten*. Hij gaf wel college over beide onderwerpen. Ik heb nog het genoegen mogen smaken van hem zowel de zeer geavanceerde programmeertaal ALGOL68 te leren als vrij exotische numerieke algoritmen, bijvoorbeeld voor het versnellen van de convergentie van reeksen. Toen Dirk Dekker hier in 1971 benoemd werd tot gewoon hoogleraar informatica en numerieke wiskunde, begonnen de beide onderwerpen echter al behoorlijk uit elkaar te lopen. Nu is informatica het vak van de *software engineering* en de programmeertalen, en van de informatiesystemen en het internet. De numerieke wiskunde is als vak veel wiskundiger van aard geworden, maar leunt wat betreft toepassingen sterk op software en heeft in die zin dus wel een belangrijke informaticacomponent.

Wat voert een professioneel wiskundige nu dagelijks uit? Wat doe je dan? Weet je nu nog niet genoeg? Wat is nu precies numerieke wiskunde? En wat doe jij er dan mee? Vragen die me tijdens mijn loopbaan al vele malen gesteld zijn en die ik waarschijnlijk nooit naar volle tevredenheid heb beantwoord. Dames en heren, onder het motto 'de aanhouder wint', ga ik proberen vandaag nogmaals een tipje van de sluier op te lichten.

Een belangrijk kenmerk van wiskunde is het bestuderen van de werkelijkheid via abstractie, via abstracte wiskundige modellen. Het gereedschap hiervoor wordt gevormd door symbolen, door axioma's en definities, door formules, vergelijkingen en wiskundige stellingen. Een voorbeeld van een stelling is $a^2 + b^2 = c^2$, de bekende stelling van Pythagoras, de Griekse filosoof die leefde van circa 580 tot 504 voor Christus. Deze stelling beschrijft met een wiskundige formule dat voor iedere rechthoekige driehoek, het kwadraat van de lengte van de schuine zijde, hier c genoemd, gelijk is aan de som van de kwadraten van de lengtes van de twee rechte zijden, hier a en b genoemd. Deze stelling gaat op voor iedere rechthoekige driehoek, hoe groot of klein ook, en je kunt dus zeggen dat deze stelling van Pythagoras de lengtemeting van de rechthoekige driehoek abstraheert. In gewoon Nederlands: de formule $a^2 + b^2 = c^2$, tilt de driehoek als het ware boven de werkelijkheid uit, het kenmerk van abstractie.

Abstractie heeft iets hogers, iets intellectueels. Wiskunde wordt daarom ook wel ‘de moeder van alle wetenschappen genoemd’ en sommigen gaan zo ver het ‘de hoogste vorm van denken’ te noemen. Ik geef toe, dit is controversieel, maar ik zal het vandaag niet tegenspreken. Wel is zeker dat de professionele wiskundige ‘het hoogste’ altijd nastreeft, een stelling die je naam draagt, een wiskundig universele waarheid, een abstract resultaat dat collega’s overal ter wereld verder helpt met hun onderzoek. Maar abstractie heeft zeker ook iets moois, denkt U maar aan de schone kunsten waar het in allerlei verschijningsvormen aanwezig is. Van de andere kant is het ook buitengewoon handig en praktisch omdat ons abstracte gereedschap universeel is en daarmee de communicatie bevordert. Als ik bijvoorbeeld op een internationaal congres met een Russische wiskundige over de Stelling van Pythagoras wil praten, en ons beider Engels schiet daarvoor tekort, dan hoef ik slechts $a^2 + b^2 = c^2$ op te schrijven en het contact is gelegd.

De ontwikkeling van dit universele gereedschap van formules, van stellingen en vergelijkingen, is een proces van eeuwen en gaat terug tot de Griekse en oriëntaalse beschaving van honderden jaren voor Christus. Mijn voornaamste belangstelling gaat uit naar de *differentiaalvergelijkingen*. De eerste grondslagen voor dit type vergelijkingen, in de vorm zoals we ze nu gebruiken, zijn al gelegd in de zeventiende eeuw. Sinds die tijd handelt een aanzienlijk deel van de wiskundige analyse over differentiaalvergelijkingen en behoren deze vergelijkingen tot de kern van de toegepaste wiskunde. Een recent lezenswaardig boek in dit verband is *Analysis by Its History* van Hairer en Wanner (1997), twee bekende numerici uit Genève met een grote belangstelling voor de geschiedenis van de analyse. Het is goed dat er boeken over de geschiedenis van ons vak geschreven worden. Het herinnert ons eraan dat we met een belangrijk wetenschappelijk en cultureel erfgoed te maken hebben waar mee we zuinig moeten omspringen.

Wat nu is een differentiaalvergelijking? U moet dan denken aan een wiskundig model van iets waarbij verandering een rol speelt, aan snelheden en versnellingen, aan toestanden die veranderen onder invloed van krachten. De meeste differentiaalvergelijkingen zijn in feite dan ook niets anders dan wiskundige beschrijvingen van verschijnselen of wetten uit de natuurkunde, de mechanica en vele andere vakken. Met zulke vergelijkingen kan men dus de toestand en het gedrag van allerlei systemen in ruimte en tijd beschrijven. De oplossing van de bijbehorende vergelijking geeft dan de toestand van het systeem weer. Men kan hierbij aan allerlei toepassingen denken. Bijvoorbeeld aan het weer, of aan de chemie van de atmosfeer in ver-

band met luchtvervuiling (zie Graedel en Crutzen, 1995), of aan Uw mobiele telefoon die gebruik maakt van zeer gecompliceerde elektrische schakelingen. Wiskundig gezien is zo'n schakeling een gewone differentiaalvergelijking met *constraints* waarvan de oplossing stroompjes, spanningen en weerstanden representeert.

Aangezien het zelden voorkomt dat de toestand, de oplossing, exact bekend is, worden veel vergelijkingen op de computer doorgerekend om de oplossing te benaderen. Het is hier dat de *numerieke wiskunde* om de hoek komt kijken, het wetenschappelijk rekenen. De numerieke wiskunde wordt hier dan veelal gebruikt als hulpmiddel in ontwerpfases van iets nieuws, of om verschijnselen te bestuderen die in laboratoria niet goed zijn na te bootsen of in een laboratoriumopstelling gewoon te duur zijn. Denkt U maar aan de eerder genoemde luchtvervuiling. Als je dit op mondiale schaal wilt bestuderen zijn wiskundige rekenmodellen onontbeerlijk. De numerieke wiskunde is daarom vandaag de dag een belangrijke discipline. Het heeft een centrale positie in de toegepaste wiskunde en kent een interactie met vele wetenschappen waar wiskunde gebruikt wordt.

Dames en heren, ik zal U nu proberen duidelijk te maken waar het in de moderne numerieke wiskunde om draait. Noodgedwongen met weglating van veel belangrijke wiskundige zaken, zal ik dat doen door drie belangrijke hoofdrolspelers van het wetenschappelijk rekenen ten tonele te voeren, het *algoritme*, de *computer* en de *toepassing*. De interactie tussen deze drie stuurt de vooruitgang. Het algoritme vertegenwoordigt de wiskunde en ligt aan het begin. De toepassing ligt aan het einde en stelt de uitdaging. De computer is hierbij een krachtig hulpmiddel en helpt ons grenzen te verleggen.

Het algoritme

Onze eerste hoofdrolspeler is het algoritme. Een algoritme is een *rekenschema*, een geheel van regels dat precies aangeeft hoe een gewenste berekening op de computer dient te verlopen. Voorbeelden van klassieke algoritmen zijn nulpuntzoekers en interpolatiemethoden om continue functies uit discrete data te reconstrueren. Voorbeelden van moderne algoritmen zijn iteratieve methoden voor grote lineaire stelsels, multigrid- en Krylovmethoden. Algoritmen waar ik zelf onderzoek naar doe,

zijn *integratiemethoden* voor tijdsafhankelijke differentiaalvergelijkingen, zowel gewone als partiële.

Wat is een integratiemethode? Een integratiemethode kunt U zich voorstellen als een recurrente betrekking, waarmee op discrete tijden de evolutie van de differentiaalvergelijking wordt gesimuleerd. We doen dit door deze betrekking herhaald toe te passen, stap voor stap, met kleine tijdstapjes vooruit in de tijd. Zeer bekend zijn de lineaire meerstaps- en de Runge-Kuttamethoden. Deze zijn zowel geschikt voor de gewone als de partiële vergelijkingen, maar met name voor de partiële differentiaalvergelijkingen bestaan veel tussenvormen. In ieder geval moet bij deze vergelijkingen de recurrente betrekking worden uitgevoerd op alle cellen van een ruimtelijk rekenrooster waarop aanwezige ruimtelijke partiële afgeleiden zijn gediscretiseerd. U kunt zich voorstellen dat zulke recurrente betrekkingen al snel zeer gecompliceerd zijn als er in drie ruimtedimensies gerekend moet worden en het aantal roosterzellen in de miljarden kan lopen.

Numerieke algoritmen worden in hogere programmeertalen op de computer gecodeerd. Dit leidt tot *numerieke software*, een belangrijk product van de numerieke wiskunde. In 1981, toen alles nog klein en overzichtelijk leek, heeft de bekende Amerikaanse numeriek wiskundige Bill Gear (zie Gear, 1981) in een artikel eens geschetst hoe zulke software tot stand is gekomen voor vergelijkingen met grote Lipschitzconstanten, de stijve differentiaalvergelijkingen. Hij beschrijft daarin een ontwikkeling over een periode van zo'n twintig jaar. Dit begint met de identificatie van het probleem stijfheid en eindigt voor hem met de bekende BDF-solvers. In die twintig jaar worden de eerste trial-en-error algoritmen gebouwd, vindt er wiskundige analyse plaats, productiesoftware wordt ontwikkeld, *benchmarks* worden gepubliceerd, enzovoorts.

Dit artikel van Gear vind ik leerzaam, omdat het op een duidelijke wijze een belangrijk facet van het numeriek wiskundig onderzoek benadrukt, namelijk de voortdurende wisselwerking tussen enerzijds *ontwerp en analyse* en anderzijds *implementatie en toepassing*. Zonder een goed oog voor deze wisselwerking krijgt men naar mijn ervaring geen vat op geavanceerde algoritmen. Gear besprak BDF-algoritmen voor stijve differentiaalvergelijkingen. Je kunt zijn conclusies zo overdragen naar bijvoorbeeld multigrid en iteratieve methoden, positieve eindige-volume schema's voor hyperbolische vergelijkingen, en vele andere technieken.

Gear's artikel is daarom nog steeds relevant en geldt met kracht voor de groot-schalige complexe toepassingen van vandaag. Zijn artikel zegt in feite: we kunnen

veel, zo niet alles uitrekenen. Maar willen we het goed doen dan kost het tijd, veel tijd. Dit is onvermijdelijk. Hogere wiskunde is nu eenmaal zeer kennisintensief. Er komt veel bij kijken. In toneeltermen gevat: ingewikkelde formules, vergelijkingen en algoritmen zijn geen kortdurende eenakters. Hun abstracte voorstelling duurt lang, omdat er veel aan te beleven valt. Dit maakt het boeiend, maar zeker niet makkelijk. Essentieel voor echte vooruitgang daarom, is blijvend aandacht schenken aan de wisselwerking tussen de wiskundige analyse, het toepassen van het algoritme, en het verbeteren van de software.

Consistentie, convergentie en stabiliteit

Ik wil nu kort ingaan op de analyse. Bij de wiskundige analyse van algoritmen hantieren we in eerste instantie drie begrippen. Dit zijn *consistentie*, *convergentie* en *stabiliteit*. Laten we aannemen dat ons algoritme een differentievergelijking is, waarmee we een differentiaalvergelijking op een rekenrooster hebben gediscretiseerd. Met het eerste begrip, *consistentie*, analyseren we dan hoe nauwkeurig de differentievergelijking de differentiaalvergelijking benadert. Consistentie is een asymptotisch begrip met de maaswijdte van het rekenrooster als parameter. Door de maaswijdte naar nul te laten gaan, dus door het rooster te verfijnen, kunnen we zo de orde van benadering bepalen. Dit gaat bij differentievergelijkingen rechttoe-rechtaan met Taylorreeksen. Met het tweede begrip, *convergentie*, beschrijven we hoe de oplossing van de differentievergelijking, de te vinden exacte oplossing op het rekenrooster benadert. Hier is het ons om te doen. We moeten dus feitelijk de differentievergelijking gaan oplossen, ofwel het algoritme gaan uitvoeren. En hier komt ons derde begrip, *stabiliteit*, in beeld. Het woord zegt het al, het is nu oppassen geblazen.

We noemen een algoritme *stabiel* als we tijdens de uitvoering ervan aanwezige fouten begrensd kunnen houden, en dit moet gelden op ieder rekenrooster, hoe fijn ook gekozen. Wat begrensd precies betekent, hangt van de omstandigheden af; in ieder geval wordt bedoeld dat fouten niet onbegrensd kunnen groeien. Numerici grossieren in fouten. We kunnen in feite niet zonder, omdat we met benaderingen van exacte oplossingen manipuleren. Inderdaad, voor de echte numericus geldt: *een dag zonder fouten is een dag zonder wiskunde*. Voor een goed begrip: ik doel hier op fouten die wiskundig gedefinieerd zijn, discretisatiefouten, dus fouten die zich wiskundig laten analyseren. Foutenanalyse is in feite de kern van ons vak en komt dus veelal neer op *stabiliteitsanalyse*. Inzicht en kennis van stabiliteit is essentieel in de nume-

rieke wiskunde. Indien een algoritme niet stabiel is, kun je er zeker van zijn dat tijdens de uitvoering zelfs de allerkleinste fouten, de afrondfouten, onbelemmerd gaan groeien. Overflow, een digitale explosie, is dan onvermijdelijk. De computer kan dan niet meer optellen, aftrekken, vermenigvuldigen en delen. Hij geeft er dan de brui aan en hij heeft gelijk. Rekenen met een instabiele methode is numeriek wiskundig gezien een doodzonde.

In de volledige analyse van een differentiaalalgoritme koppelen we de drie besproken begrippen met de stelling: *een consistent algoritme is convergent dan en slechts dan als het stabiel is*. Dit is de beroemde equivalentiestelling van Lax (zie Richtmyer en Morton, 1967, en Strikwerda, 1989). Het zegt ons dat, willen we de exacte oplossing nauwkeurig benaderen door roosterverfijning, stabiliteit noodzakelijk is. Lax heeft zijn stelling bewezen voor lineaire problemen in Banachruimten. Voor de meeste praktijksituaties bestaat er geen streng wiskundig bewijs. In de strikt wiskundige zin is het dan geen stelling, het is niet wiskundig zeker, het is slechts een bewering. Maar het brengt wel precies de essentie van de analyse in beeld en niemand twijfelt er dan ook aan.

Foutenanalyse

Ik wil nog een paar minuten besteden aan de numerieke foutenanalyse omdat hier voor ons vaak de lekkerste krenten in de pap zitten. Foutenanalyse leunt sterk op de gewone analyse. Ruim gebruik van Fourieranalyse, functionaalanalyse, complexe functietheorie en lineaire algebra of matrixrekening is onontbeerlijk. Zeer belangrijk is ook bij het opzetten van een discretisatie rekening te houden met de dynamische eigenschappen van het probleem en de kwalitatieve eigenschappen van de oplossingen.

Het loont om behoudswetten te respecteren. Het loont om oplossingen positief te houden. Wiskundig gezien moeten we eigenlijk zo diep als mogelijk is in het probleem en de algoritmen zien af te dalen, terwijl tegelijkertijd de numerieke efficiëntie bewaakt dient te worden. We moeten dan een vaak moeilijk begaanbaar gebied betreden. Hier telt – en nu citeer ik uit het afscheidscollege van De Jager (1992) – *de Macht van de Concrete Ervaring*. Immers, dynamische eigenschappen en oplossingen zijn zeer divers. Denkt U maar aan de verschillen tussen gewone differentiaalvergelijkingen, parabolische en hyperbolische vergelijkingen, golfvergelijkingen, enzovoorts.

Voor differentievergelijkingen ligt het begin van de foutenanalyse altijd bij de *Fourieranalyse*, zie bijvoorbeeld Pinkus en Zafrany (1997). Hiermee kunnen we zowel continue functies als roosterfuncties in de harmonische bouwstenen ontbinden. Onder de aanname van lineariteit, constante coëfficiënten en periodieke randvoorwaarden, zijn deze bouwstenen zowel eigenfuncties voor differentiaal- als differentieoperators waardoor ze zich uitstekend lenen voor de numerieke analyse. Dit idee wordt toegeschreven aan het wiskundemirakel Von Neumann, die leefde van 1903 tot 1957 en die ook op andere gebieden van de wiskunde fundamentele bijdragen heeft geleverd (zie Simmons, 1997 en Landsman, 1999). We spreken daarom van *Fourier-von Neumann analyse*. Deze analyse laat zich ook combineren met de bekende aanpak van Dahlquist (1959), voor de stabiliteit van de recurrenente betrekkingen bij tijdsintegratie. Daardoor is *Fourier-von Neumann analyse* zo belangrijk. Het verschaft veel inzicht omdat we precies kunnen nagaan wat een algoritme doet. Het laat bijvoorbeeld ook dispersie- en dissipatie-eigenschappen zien.

Uiteraard weegt de beperking van lineariteit, constante coëfficiënten en periodieke randvoorwaarden zwaar. In de praktijk is hier bijna nooit aan voldaan. Wat we dan kunnen doen is de *Fourier-von Neumann analyse* lokaal toepassen door linearisatie, bevriezen van coëfficiënten, en weg te blijven van de rand. Dit leidt niet tot wiskundig strenge resultaten, maar het inzicht blijft. Willen we meer weten, dan wordt het al snel veel moeilijker. We gaan dan over tot het bestuderen van specifieke modellen en algoritmen welke zich wel lenen tot een wiskundig strenge aanpak. Dit is soms mogelijk met de *resolventconditie van Kreiss* (zie Richtmyer en Morton, 1967 en Spijker, 1996), of met de *energiemethode* (zie Richtmyer en Morton, 1967), of met de *logaritmische norm* (zie Dahlquist, 1975 en Dekker en Verwer, 1984).

Voor problemen met een behapbare structuur bestaan dus veel mooie resultaten. De niet-lineaire hyperbolische problemen en golfvergelijkingen die tot de familie van de Hamiltonsystemen behoren, kunnen hier niet ongenoemd blijven. Hyperbolische problemen laten discontinue oplossingen toe, wat eigen specifieke algoritmen vereist. Behoud van positiviteit en verschillende vormen van monotoniteit spelen hierbij een grote rol (zie Leveque, 1992 en Wesseling, 2000). Voor de Hamiltonsystemen loont het ook om speciale algoritmen te ontwerpen, omdat standaard algoritmen de meetkundige structuur wel benaderen, maar niet exact behouden. Dit kan bij simulaties over lange tijdsintervallen voor een te grote foutopbouw zorgen (zie Sanz-Serna en Calvo, 1994).

Helaas, veel niet-lineaire problemen en algoritmen laten zich analytisch niet goed beetpakken. Dan moeten we wat betreft stabiliteit ons toch verlaten op de heuristische *Fourier-von Neumann* aanpak. Dit is bijvoorbeeld het geval voor advec-tie-diffusie-reactieproblemen waarmee transport van verontreiniging in bodem, water en lucht wordt gemodelleerd, het soort van vergelijkingen dat in recente ja-ren uitvoerig numeriek is onderzocht op het CWI (zie Van der Houwen en Som-meijer, 2000 en Verwer et al., 2001). Voor deze vergelijkingen kunnen we met *Fourier-von Neumann analyse* gelukkig redelijk goed uit de voeten. In het algemeen hebben deze vergelijkingen mijn bijzondere belangstelling, omdat drie belangrijke prototypes elkaar ontmoeten: de hyperbolische, de parabolische, en de gewone dif-ferentiaalvergelijking. Deze drie zijn compleet verschillend van aard en vragen ie-der voor zich om een andere aanpak. Toch moeten ze gezamenlijk worden opgelost. Hierin ligt de uitdaging. Een praktische aanpak die ik voorsta is *operator splitting* of een aanverwante techniek. Het is hiermee mogelijk om optimale schema's voor de deeloperators efficiënt te combineren in één overkoepelend algoritme voor het totale probleem (zie Verwer et al., 1999).

De computer

Dames en heren, genoeg nu over de analyse. Ik ga verder met de tweede hoofdrol-speler van het wetenschappelijk rekenen: de rekenautomaat, de computer. De ont-wikkelingen hier zijn al jaren spectaculair. U weet dit net zo goed als ik. Van het multimediamonster dat U thuis hebt staan, konden wij wetenschappers nog maar kort geleden slechts dromen. De pc heeft zich ontwikkeld tot een consumentenar-tikel dat in miljoenenoplagen over de toonbank gaat. De wetenschap profiteert daarvan mee omdat dit de prijs drukt en investeringen in de ontwikkeling van hard-en software betaalbaar maakt, en op gang houdt. De *wet van Moore* zegt dat de presta-tie van de computer per anderhalf jaar verdubbelt. Hoe lang dit nog door zal gaan, is moeilijk in te schatten. Het ziet er echter naar uit dat met de huidige Gigaherz pro-cessor van Uw pc het einde nog niet in zicht is.

Voor wetenschapsbeoefening, en zeker voor informatica en wiskunde, is de ge-stage toename in snelheid en geheugen een niet te onderschatten factor. Het beïn-vloedt sterk onze manier van werken en het zet aan tot het oppakken van nieuwe problemen die tot voor kort nog als onneembaar werden beschouwd, wat op zijn

beurt weer een stimulans geeft voor nieuw onderzoek en voor de ontwikkeling van nieuwe algoritmen.

Een goed voorbeeld hiervan vormen de vector- en de massaal parallelle machines, de beloften van de jaren tachtig en negentig. Deze supercomputers hebben in sterke mate het *grootschalig rekenen* in gang gezet, het rekenen aan grote complexe problemen die met de toenmalige werkstations onneembaar waren. Vele numerici hebben deze ontwikkeling opgepakt en zijn nieuwe algoritmen gaan bouwen die de specifieke architectuur van de supercomputer konden uitbuiten. Het streven hierbij was zo goed mogelijk de *peak performance* te naderen, dus een puur snelheidsstreven. Echter, deze dure getallenkrakers hebben het nu moeilijk. De vectorcomputer dreigt van het toneel te verdwijnen, en, afgezien van zeer grootschalig rekenwerk in de productiesfeer, lijkt het massaal parallel rekenen met de huidige inzichten en hulpssoftware nog steeds veel te bewerkelijk voor het reguliere numerieke onderzoek.

De numerici tonen daarom nu minder actieve belangstelling voor de supercomputer. Hoe kan het ook anders. De huidige concurrentie van de pc is enorm. De opmars van Linux is niet te stuiten. Het kost weinig, het is makkelijk in gebruik, het rekt snel, en het zal waarschijnlijk nog veel sneller gaan rekenen. We moeten er, denk ik, wel van uitgaan dat als de atomaire grens voor de enkele computerchip bereikt is, het parallelisme in een of andere vorm toch zal gaan opbloeien.

Een interessante vraag is of de ontwikkeling van nog snellere computers relevant blijft voor ons onderzoek? Ik denk van wel. Voor niet al te groot routinematig werk zal meer capaciteit nauwelijks nog meerwaarde opleveren, maar voor innovatief onderzoek zullen we van de computer altijd het volle pond blijven vragen. Wetenschappelijk rekenaars zijn gefixeerd op snelheid. Ons gevoel bij onderzoek is dat de computer altijd te langzaam rekt en hier handelen we ook naar. Dit is geen vorm van verslaving; voor veel toepassingen zijn hier goede argumenten voor aan te dragen. Veronderstel maar eens dat we in drie ruimtedimensies een hyperbolische vergelijking oplossen door middel van een expliciete methode van orde 2, wat gangbaar is, en dat we een zekere berekening een factor 10 nauwkeuriger willen maken. Een betrouwbare schatting leert dan dat het aantal rekenoperaties niet met een factor 10, maar met een factor 100 omhoog moet. Dit is aanzienlijk en in veel situaties nog steeds ondoenlijk, omdat de antwoorden te lang op zich zouden laten wachten.

U begrijpt, als je in vier dimensies rekent, ruimte plus tijd, is een toename in capaciteit met de snelheid van de wet van Moore snel opgesoupeerd. U denkt nu misschien dat een toename van een factor 10 in resolutie overdreven is? Nee, dat is niet overdreven. Bijvoorbeeld, in veel toepassingen wordt een vorm van *parametrisatie* gebruikt, om door de computer geachte onberekenbare kleine schalen uit de exacte oplossing in de berekening te verdisconteren. Dit geeft aanleiding tot extra fouten die men kan verminderen door nauwkeuriger numeriek te simuleren. Bekende voorbeelden zijn stromingen door sterk heterogene poreuze media en studies over turbulentie. In andere applicaties, waar met de huidige algoritmen de numerieke fouten kleiner zijn dan de modelfouten, en meer numerieke nauwkeurigheid dus niet zinvol is, wil men nog steeds de duur van de berekening terugbrengen. Dit is bijvoorbeeld het geval in onderzoek naar mondiale luchtvervuiling en klimaatstudies. Hier kunnen enkele runs op snelle supers nog dagen duren, wat veel te lang is als er veel scenario's geanalyseerd moeten worden. De rol die de ontwikkeling van de computer voor dit soort onderzoek speelt, zal daarom aanzienlijk blijven.

De computer beïnvloedt ook meer en meer de manier van werken van mijn collega's *analytici*. Hun primaire oogmerk is niet om iets uit te rekenen, maar om iets uit te zoeken. Zij onderzoeken de eigenschappen van vergelijkingen en hun oplossingen. Zoals, bestaat er een golf front, is deze uniek, is deze stabiel, en met welke snelheid verplaatst het front zich. De *diehards* onder hen hebben hierbij genoeg aan pen en papier. Zij zijn streng in de leer, ze willen bewijzen zien en hebben niet zo veel op met die rekenaars. Ze verliezen echter terrein door de beschikbaarheid van steeds beter toegankelijke, zeer geavanceerde numerieke software. Een sprekend voorbeeld is MATLAB, de matrix laboratory. MATLAB is een interactief numeriek softwaresysteem voorzien van graphics dat op iedere computer geïnstalleerd kan worden.² Het is zeer laagdrempelig en bevat voor studenten en onderzoekers binnen en buiten de wiskunde *toolboxes* voor specifieke toepassingen. De meest recente versie heeft bijvoorbeeld al een *toolbox* voor partiële differentiaalvergelijkingen in twee ruimtedimensies die ik zo thuis op m'n pc kan draaien. Meer geavanceerd is FEMLAB,³ een op MATLAB gebaseerd eindige-elementen pakket. De toegankelijkheid van deze software, gepaard aan een hoge rekensnelheid, maakt het aantrekkelijk snel een vermoeden te testen en na te gaan of het überhaupt loont een lange theoretische weg in te slaan die mogelijk dood kan lopen. We zien hiermee dat door de snelle computers van vandaag, numerieke algoritmen ook een nuttige rol kun-

nen spelen in de wiskundige analyse, het meer op fundamentele aspecten gerichte onderzoek.

Een mooie illustratie hiervan uit eigen ervaring wil ik graag aan U kwijt. Enige jaren terug is op het CWI onder mijn leiding promotieonderzoek uitgevoerd door Zegeling (1992) en Trompert (1994), naar adaptieve methoden. Dit zijn methoden die gebruikmaken van lokale roosterverfijning en zelfs van bewegende roosters om kleinschalig lokaal gedrag efficiënt te berekenen. Toepassingen die we toen op het oog hadden waren divers, o.a. grondwaterstroming rondom zoutkoepels, in samenwerking met het RIVM, en diverse technische toepassingen, in samenwerking met Shell en de Stichting Technische Wetenschappen. Door verder onderzoek van Blom (zie Blom en Verwer, 1994) op het CWI en Zegeling aan de Universiteit van Utrecht, heeft dit *solvers* opgeleverd die hun weg hebben gevonden naar diverse gebruikers, waaronder Doelman van het Korteweg-de Vries instituut en Ebert op het CWI. Zij werken aan patroonherkenning bij dynamische systemen. Wat blijkt: de adaptieve *solvers* zijn voor patroonherkenning een handig hulpmiddel om zeer kleinschalige structuren in ingewikkelde patronen efficiënt uit te vergroten en zo te bestuderen. Zo ondersteunen deze geavanceerde numerieke *solvers* het fundamentele onderzoek naar wiskundige patronen.

Ik sluit mijn lofzang op de computer af met een relativerende opmerking. Enige terughoudendheid in computergebruik blijft geboden. Een computer berekent namelijk alleen waar je om vraagt. Het is dus belangrijk dat je weet waar je om vraagt, dat er voldoende inzicht is in het wiskundige model en de gebruikte data alvorens de computer wordt aangewend. Zeker, dit is een open deur. Maar met de toenemende complexiteit, rekensnelheid en beschikbare software neemt de verleiding om te snel te gaan testen toe, zeker als het met de analyse niet goed wil lukken. Ik observeer en ervaar dit regelmatig. Het wantrouwen van de *diehards* uit de analyse is dus zeker niet onterecht.

De toepassing

Dames en heren, ik ga verder met onze derde hoofdrolspeler van het wetenschappelijk rekenen: de toepassing. Wiskunde vindt men in vrijwel iedere tak van wetenschap waar men kwantitatieve methoden gebruikt. Veel toepassingen genereren zelf ook interessante wiskunde. Ik heb deze interactie al eerder genoemd.

Computational science

Vanuit het perspectief van numeriek modelleren en computersimulatie, manifesteren toepassingen zich tegenwoordig met de verzamelnaam *computational sciences*. Deze naam in de jaren negentig in zwang geraakt. Het betreft voornamelijk allerlei technische wetenschappen waar computersimulatie en numerieke modellen het hebben overgenomen van laboratoriumexperimenten en schaalmodellen. Alhoewel het als onderwerp niet echt nieuw is, is het belang van *computational sciences* groot en vindt er nog steeds ontwikkeling plaats. Dit zal zeker doorgaan. In Nederland stimuleert NWO⁴ het met gericht beleid, zoals met het recent gestarte *computational science*-programma.

Zoals U weet, zien we in recente jaren tevens een sterke opkomst van de levenswetenschappen, de biologiedisciplines waar men onderzoek doet op genetisch en moleculair niveau. Hier ontstaan nieuwe interacties met wiskunde, informatica, natuur- en scheikunde. De verwachting is dat *computational science* ook hier een belangrijke rol gaat spelen zodat overal ter wereld nieuw onderzoek is gestart, zo ook op het CWI.⁵ Of het net zo'n breed succes zal worden als in de technische wetenschappen moeten we afwachten, omdat de complexiteit van biologische processen vaak veel groter is dan van technische processen. Ik denk dat we pas over een jaar of tien de eerste echte balans kunnen opmaken.

Zeker is dat de *computational science*-ontwikkelingen gunstig zijn voor de toegepaste wiskunde, en de numerieke wiskunde in het bijzonder. Het vergroot het afzetgebied en gebruik van onze kennis en algoritmen. Het laat zien dat ons werk belangrijk is. Het draagt tevens nieuwe problemen aan, nieuw onderzoek, dus brood op de numerieke plank. Kortom, hoofdrolspeler 'toepassing' heeft een belangrijke rol en hij speelt die met verve, daarbij krachtig ondersteund door de regisseurs van het wetenschapsbeleid. In het algemeen ben ik het hiermee eens.

Analyse en toepassing

Echter, dit gezegd hebbende, wil ik nog een keer met nadruk wijzen op het belang van de wisselwerking tussen *analyse* en *toepassing*, vanuit het perspectief van de numerieke wiskunde. Deze wisselwerking impliceert dat aan toepassingen werken nuttig is om het algoritmische kaf van het koren te scheiden. Met analyse alleen lukt dit onvoldoende, in het bijzonder voor moeilijke niet-lineaire problemen. Van de

andere kant impliceert deze wisselwerking ruim aandacht voor de wiskundige analyse om op de lange termijn voortgang te kunnen boeken. Ik breng U nogmaals het voorbeeld van Bill Gear in herinnering. Een cruciaal punt hierbij is dat analyse tijd vraagt en een zekere afstand vereist tot de concrete toepassing. Het vraagt voldoende ruimte voor abstractie, het eigene van wiskunde, voldoende ruimte voor het stellen van wiskundige vragen, in andere termen, voldoende ruimte voor autonoom, disciplinair gericht onderzoek. Hier moeten we als wiskundig onderzoekers alert in blijven. Dit klinkt vanzelfsprekend, maar de praktijk is anders. De financiële ruimte voor wiskundig onderzoek is nu eenmaal krap, zodat aan keuzes niet valt te ontkomen. De ervaring van de laatste jaren is dat het disciplinair gerichte onderzoek het dan om allerlei redenen nogal eens aflegt tegen de financiële druk van de toepassing.

Afsluiting

Waarde toehoorders, ik kom aan het einde van mijn rede. Wiskundig inhoudelijk over mijn vak en onderzoek hebt U niet veel gehoord. Dat leek me niet zo passend voor zo'n groot gemengd gezelschap. Ik heb U wel geprobeerd te schetsen wat numerieke wiskunde inhoudt, waar het vandaag de dag om draait, welke facetten belangrijk zijn. Ik heb dat gedaan door drie hoofdrolspelers ten tonele te voeren, het *algoritme*, de *computer* en de *toepassing*. Ik heb geprobeerd U duidelijk te maken dat de interactie tussen deze drie de vooruitgang bepaalt. Het algoritme vertegenwoordigt de wiskunde en ligt aan het begin. De toepassing ligt aan het einde en stelt de uitdaging. De computer is een krachtig hulpmiddel en helpt de grenzen te verleggen. Binnen de wiskunde is het vak numerieke wiskunde relatief jong, ruim vijftig jaren oud. Ik zal me vandaag niet wagen aan een voorspelling hoe het zich verder zal ontwikkelen. Voorspellingen komen zelden uit. Wat ik wel zeker weet, is dat het algoritme, de computer en de toepassing hun hoofdrol zullen blijven spelen en dat er interessant en uitdagend onderzoek in het verschiet ligt, en dat onder het motto *een dag zonder fouten, is een dag zonder wiskunde*.

Dankwoord

Tot slot wil ik enige woorden van dank uitspreken, allereerst in de richting van het Bestuur en Curatorium van de Stichting voor Hoger Onderwijs in de Toegepaste Wiskunde. Mijne heren, U hebt na het emeritaat van mijn voorganger besloten de leerstoel opnieuw toe te wijzen aan het vakgebied der numerieke wiskunde. Een wijs besluit. Ik ervaar mijn benoeming als een bijzondere eer en zal naar beste weten en vermogen het doel van de Stichting bevorderen. Ik wil hierbij Professor Koornwinder, directeur van het Korteweg-de Vries instituut, apart noemen. Beste Tom, van de zijde van het KdV heb jij mijn benoeming gestimuleerd en geregeld. We hebben inmiddels een prima verstandhouding.

Mijn werkgever is het CWI, het *Centrum voor Wiskunde en Informatica*. Dit centrum is het nationale onderzoeksinstituut voor de wiskunde en informatica in Nederland. Het CWI opereert zelfstandig, los van de universiteiten en onder de paraplu van NWO, de Nederlandse Organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek. Het CWI streeft naar een nauwe samenwerking met de universiteiten en stimuleert in dit verband benoemingen van medewerkers. Vier van mijn vijf voorgangers kwamen ook van het CWI. We kunnen dus vaststellen dat de Stichting een uitstekende band heeft met mijn werkgever. Beste Gerard, het was plezierig te ervaren hoe jij als directeur mijn benoeming van CWI-zijde hebt bevorderd en afgehandeld.

Hooggeleerde Van der Houwen, beste Piet. Jarenlang was jij mijn directe chef ten tijde van de afdeling Numerieke Wiskunde van het CWI. In die tijd heb ik veel van je geleerd. Dit komt goed van pas nu ik zelf leiding geef aan MAS, de afdeling 'Modelling, Analysis and Simulation', waarin de numerieke wiskunde in 1997 is opgegaan. Tevens ben je mijn promotor en daarnaast ook mijn voorganger op de leerstoel van de Stichting. In jouw tijd zijn vijf jonge CWI-medewerkers die onder mijn supervisie waren opgeleid bij jou gepromoveerd. We kunnen ook in dit verband spreken van een zeer vruchtbare samenwerking.

Hooggeleerde Van Duijn, beste Hans. Ik heb jou goed leren kennen in 1996 tijdens de interne reorganisatie van het CWI, de kanteling. We hebben toen veel met elkaar gesproken over de stand van zaken in de toegepaste en numerieke wiskunde en de toekomst. Je kwam van buiten, stelde andere vragen en was kritisch. Jij ging MAS leiden en werd dus mijn directe chef, en tegelijkertijd deed je je onderzoek binnen mijn thema. Dit kan alleen maar goed gaan als je uitstekend met elkaar kunt

opschieten. Een mooi aanbod voor een hoogleraarspositie in Eindhoven heeft je doen besluiten ons weer te verlaten, jammer voor de wiskunde op het CWI.

Beste collega's van het CWI en in het bijzonder van de afdeling MAS. Onze uitstekende verstandhouding is voor mij plezierig en stimulerend. Met drie van jullie, Joke Blom, Willem Hundsdorfer en Ben Sommeijer, werk ik al heel lang samen in steeds wisselende omstandigheden op het gebied van tijdsintegratie. Op dit moment gaat een flink deel van mijn tijd op aan het schrijven van een boek met Willem over het numeriek oplossen van advection-diffusion-reaction problems. Dit is een veezienswaardige van een oud plan, ooit samen gesmeed met Sanz-Serna, en is een prachtige klus. Willem trekt dit en ik moet flink m'n best doen om hem bij te houden. Beste Joke, Willem en Ben, ons gezamenlijk onderzoek heeft voor mij persoonlijk al vele vruchten afgeworpen. Ik hoop nog lang van jullie vakkennis, inzet en enthousiasme te genieten.

Beste collega's en studenten van het Korteweg-de Vries instituut. Ik maak bij het KdV deel uit van de onderzoeksgroep 'Toegepaste Analyse en Numerieke Wiskunde' die onder leiding staat van professor Doelman. Voor de meesten van U ben ik nog een vreemde eend in de bijt, een van de hoogleraren in deeltijd die je weinig ziet en zeker niet dagelijks op het instituut aantreft. Het is aan mij bij U beter bekend te worden. Ik zal m'n best doen en hoop op een langjarig en vruchtbaar verblijf in Uw midden. Beste Arjen, je kunt op me rekenen. Zoals je weet is het m'n bedoeling om ieder jaar een college numeriek oplossen van partiële differentiaalvergelijkingen te gaan geven. Daarnaast zal ik uiteraard actief zijn in het opleiden, begeleiden en klaarstomen van onze promovendussen. Op dit moment staan drie medewerkers van het CWI op de rol. Een mooi begin zou ik zeggen.

Dames en heren, ik dank U allen voor Uw komst en Uw belangstelling.

Ik heb gezegd.

Literatuur

- J.G. Blom & J.G. Verwer, 'VLUGR3: A vectorizable adaptive grid solver for PDEs in 3D, Part I: Algorithmic aspects and applications', *Appl. Numer. Math.* 16, pp. 129-156, 1994.
- G. Dahlquist, 'Stability and Error Bounds in the Numerical Integration of Ordinary Differential Equations', PhD Thesis, *Trans. Royal Inst. of Technology*, No. 130, Stockholm, 1959.
- G. Dahlquist, 'Error analysis for a class of methods of stiff nonlinear initial value problems', in *Procs. Dundee Conference 1975*, Lectures Notes in Math., No. 506, G.A. Watson (ed.), Springer, pp. 60-74, 1975.
- K. Dekker & J.G. Verwer, *Stability of Runge-Kutta Methods for Stiff Nonlinear Differential Equations*, North-Holland, 1984.
- C.W. Gear, 'Numerical Solution of Ordinary Differential Equations: is there Anything left to do', *SIAM Review* 23, pp. 10 -24, 1981.
- T.E. Graedel & P.J. Crutzen, *Atmosphere, Climate and Change*, Scientific American Library, distributed by Freeman and Company, 1995.
- E. Hairer & G. Wanner, *Analysis by its History*, Springer, 1997.
- P.J. van der Houwen & B.P. Sommeijer, 'Factorization in Block-Triangularly Implicit Methods for Shallow Water Applications', *Appl. Numer. Math.* 36, 113-128, 2000.
- E.M. de Jager, *De Macht van de Concrete Ervaring*. Afscheidscollege Faculteit der Wiskunde en Informatica Universiteit van Amsterdam, 28 februari 1992.
- K. Landsman, 'Operatoralgebra's en quantummechanica', *Nieuwsbrief van het Korteweg-de Vries Instituut*, Uitgave september '99, pp. 15-20, 1999.
- R.J. LeVeque, *Numerical Methods for Conservation Laws*. Notes in Mathematics. ETH Zürich. Birkhäuser Verlag, 1992.
- A. Pinkus & S. Zafrany, *Fourier Series and Integral Transforms*, Cambridge University Press, 1997.
- R.D. Richtmyer & K.W. Morton, *Difference Methods for Initial-Value Problems*, Second edition, John Wiley & Sons, 1967.
- J.M. Sanz-Serna & M.P. Calvo, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman & Hall, 1994.
- J. Simmons, *De Top 100 van Wetenschappers*, Uitgeverij Het Spectrum B.V., 1997.
- M.N. Spijker, 'Numerical Stability Theory - Resolvent Conditions and Stability Estimates in the Numerical Solution of Initial-Value Problems', *Lecture Notes*, Univ. of Leiden, 1996.
- C.J. Strikwerda, *Finite Difference Schemes and Partial Differential Equations*, Chapman & Hall, 1989.
- R. Trompert, *Local Uniform Grid Refinement for Time-Dependent Partial Differential Equations*, PhD Thesis University of Amsterdam, 1994.

- J.G. Verwer, E.J. Spee, J.G. Blom & W. Hundsdorfer, 'A second-order Rosenbrock method applied to photochemical dispersion problems', *SIAM J. Sci. Comput.* 20, pp. 1456-1480, 1999.
- J.G. Verwer, J.G. Blom & W. Hundsdorfer, 'Numerical Time Integration for Air Pollution Models', *Surveys on Mathematics for Industry*, te verschijnen in 2001.
- P. Wesseling, *Principles of Computational Fluid Dynamics*. Springer, 2000.
- P. Zegeling, *Moving Grid Methods for Time-Dependent Partial Differential Equations*, PhD Thesis University of Amsterdam, 1992.

Noten

1. <http://www.science.uva.nl/research/math/index-eng.html>
2. Zie <http://www.mathworks.com/>
3. Zie <http://www.femlab.com/>
4. NWO - Nederlandse organisatie voor Wetenschappelijk Onderzoek,
zie <http://www.nwo.nl>
5. http://dbs.cwi.nl:8080/cwwwi/owa/cwwwi.print_projects?ID=5

*Eerder verscheen in 2002 in deze oratiereeks bij de
Faculteit der Natuurwetenschappen, Wiskunde en Informatica:*

Landsman, Klaas,
Wiskunde aan de grenzen van de natuurkunde

Oraties van de hoogleraren van de Universiteit van Amsterdam kunt u vinden op:
www.uva.nl/onderzoek

De numerieke wiskunde is het vakgebied van het wetenschappelijk rekenen, het uitvoeren van wiskundige berekeningen met computers voor het benaderend oplossen van wiskundige vergelijkingen. Aan de hand van drie hoofdrolspelers uit dit vakgebied, het algoritme, de computer en de toepassing, maakt Jan Verwer duidelijk waar het in de moderne numerieke wiskunde om draait. Hij verwoordt dat de interactie tussen deze drie hoofdrolspelers de vooruitgang in de numerieke wiskunde bepaalt. Het algoritme vertegenwoordigt de wiskunde en ligt aan het begin, de toepassing ligt aan het einde en stelt de uitdaging. De computer is hierbij een krachtig hulpmiddel en helpt de grenzen te verleggen.

Jan Verwer (1946) promoveerde in 1977 aan de UvA in de Numerieke Wiskunde. Hij bekleedt sinds 1 december 2000 de bijzondere leerstoel van de Stichting voor Hoger Onderwijs in de Toegepaste Wiskunde, met als leeropdracht Numerieke Wiskunde en Informatica. Hij is werkzaam bij het CWI, het Centrum voor Wiskunde en Informatica, een NWO-instituut gevestigd in Amsterdam. Hier geeft hij leiding aan de wiskundeafdeling 'Modelleren, Analyseren en Simuleren'.



VOSSIUSPERS UvA

ISBN 90 5629 226-9



9 789056 292263