Berekend in Delft

Intreerede

Prof. dr. ir. C. Vuik

15 februari 2008

Berekend in Delft

Intreerede

In verkorte vorm uitgesproken op 15 februari 2008
ter gelegenheid van de aanvaarding van het
ambt van hoogleraar Numerieke Wiskunde aan de
Faculteit van de Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica
van de Technische Universiteit Delft

door

prof. dr. ir. C. Vuik

Berekend in Delft

C. Vuik

Mijnheer de rector magnificus,
Leden van het college van bestuur,
Collegae hoogleraren en
andere leden van de universitaire gemeenschap,
Zeer gewaardeerde toehoorders,
Dames en heren,

Inleiding

In deze voordracht zullen onderzoek en onderwijs aan de orde komen. Bij de bespreking van het onderzoek zal ik starten met een uitleg van numerieke wiskunde, daarna zal ik een aantal hoogtepunten van ons onderzoek van de afgelopen jaren bespreken, waarna we een blik zullen werpen op de toekomst. Tenslotte ga ik in op het huidig onderwijs en hoe dit in de toekomst zal veranderen.

Wat is numerieke wiskunde?

Hieronder staan twee definities van numerieke wiskunde:

> *Numerieke wiskunde is een deelgebied van de wiskunde waarin algoritmes voor problemen in de continue wiskunde bestudeerd worden (in tegenstelling tot discrete wiskunde). Dit betekent dat het vooral gaat over*

> *reële of complexe variabelen, de oplossing van differentiaalvergelijkingen en andere vergelijkbare problemen die optreden in de natuurkunde en techniek.*[1]

of

> *Numerieke wiskunde is de leer der methoden voor het getalsmatig benaderen van oplossingen van wiskundige vergelijkingen met eindige rekenprocessen.* [25]

In de numerieke wiskunde wordt altijd naar optimale rekenprocessen gestreefd. Problemen waarbij de beperkte reken- of geheugencapaciteit van de computer niet belangrijk zijn, zijn vanuit numeriek oogpunt niet interessant.

Bij de TU Delft wordt numerieke wiskunde heel veel gebruikt voor het oplossen van partiële differentiaalvergelijkingen. Om dit toe te lichten starten we met een eenvoudig voorbeeld. Stel we onderzoeken hoeveel wielewalen er in een bepaald bosperceel zijn als functie van de tijd (gemeten in jaren). We starten met één paartje en verwachten dat dit in één jaar toeneemt tot twee paartjes. Hierbij is de toename het verschil in geboorte en sterfte. In formule geven we dit als volgt aan: stel $y(t)$ is het aantal wielewalen in jaar t, dan voldoet y aan het volgende beginwaardeprobleem:

$$\frac{dy}{dt}(t) = \ln 2y(t), \text{ voor } t > 0,$$

en

$$y(0) = 1.$$

[1] http://nl.wikipedia.org/wiki/Numerieke_wiskunde

De oplossing hiervan kan analytisch bepaald worden en wordt gegeven door:

$$y(t) = e^{t \ln 2}.$$

Als dit model klopt, dan neemt het aantal wielewalen exponentieel toe. Omdat het bosperceel eindig is, kan dit model niet goed zijn. Een beter model is een differentiaalvergelijking met een grens aan de groei [2]. Stel $b(t)$ is de draagkracht als functie van de tijd. Een beter model is dan:

$$\frac{dy}{dt}(t) = (b(t) - y(t))y(t), \text{ voor } t > 0,$$

en

$$y(0) = 1.$$

We kunnen dit model als volgt begrijpen: als het aantal $y(t)$ groter is dan $b(t)$ dan neemt het aantal wielewalen af, als $y(t)$ kleiner is dan $b(t)$ dan neemt het aantal wielewalen toe. Deze differentiaalvergelijking is voor algemene functies $t \to b(t)$ niet eenvoudig op te lossen. Het vinden van een numerieke benadering is echter geen probleem. Om dit uit te leggen starten we

[2] http://nl.wikipedia.org/wiki/De_grenzen_aan_de_groei

met de Euler Voorwaarts methode [25]. We kiezen een tijdstap Δt. De numerieke benadering $w_n \approx y(n\Delta t)$ wordt dan gegeven door

$$w_{n+1} = w_n + \Delta t(b_n - w_n)w_n,$$
$$w_0 = 1.$$

Het blijkt dat de fout evenredig is met de tijdstap:

$$|y(n\Delta t) - w_n| \approx K\Delta t.$$

Dus als de tijdstap naar 0 gaat dan gaat de numerieke oplossing (w_n) naar de exacte oplossing $(y(n\Delta t))$.

Een nadeel is dat deze methode alleen goed werkt als de tijdstap klein genoeg is. We noemen de methode voorwaardelijk stabiel. Voor een grote tijdstap zien we dat de oplossing naar oneindig gaat. Een alternatief is een impliciete methode, zoals de Euler Achterwaarts methode. Een nadeel hiervan is dat de oplossing op elk tijdstip bepaald moet worden uit een niet-lineaire vergelijking: bepaal w_{n+1} uit

$$w_{n+1} = w_n + \Delta t(b_{n+1} - w_{n+1})w_{n+1},$$
$$w_0 = 1.$$

Het voordeel is dat de methode stabiel is voor elke tijdstap. Impliciete methoden zijn noodzakelijk bij problemen waar verschillende tijdschalen een belangrijke rol spelen. Als voorbeeld noem ik het simuleren van reagerende stromingen bij het produceren van Integrated Circuits. Aan de ene kant duurt het enkele minuten voordat het gas van de inlaat naar de uitlaat gestroomd is, aan de andere kant kunnen sommige reacties binnen 1 milliseconde plaats vinden. Als we dit type problemen oplossen met een impliciete methode, dan moeten we heel veel (niet-)lineaire vergelijkingen oplossen. Dit kan oplopen tot miljarden vergelijkingen met miljarden onbekenden. Dit brengt mij op een ander onderwerp, waar in onze groep veel onderzoek naar gedaan wordt: het oplossen van grote lineaire stelsels.

Oplossen van grote lineaire stelsels

De meest bekende methode is de zogenaamde 'methode van vegen' of Gauss eliminatie [4]. Voor kleine stelsels is dit de beste en snelste methode. Echter voor grote problemen kunnen het geheugengebruik en de benodigde rekentijd enorm uit de hand lopen. Een alternatief is een iteratieve methode. Een aantal iteratieve methoden zijn: Gauss-Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, ICCG en MG (multi-grid) [7, 11, 28]. Om deze methoden te vergelijken beschouwen we een stelsel met N vergelijkingen en N onbekenden. De hoeveelheid werk staat opgesomd in onderstaande tabel.

Methode	aantal berekeningen
Gauss eliminatie	$N^{\frac{7}{3}}$
Gauss-Jacobi	$N^{\frac{5}{3}}$
Gauss-Seidel	$N^{\frac{5}{3}}$
SOR	$N^{\frac{4}{3}}$
CG	$N^{\frac{4}{3}}$
ICCG	$N^{\frac{7}{6}}$
multi-grid	N

Tabel 1: Orde van grootte van het aantal bewerkingen voor verschillende iteratieve methoden als functie van het aantal vergelijkingen N, voor een 3D Poisson probleem.

Door verschillende waarden van N te kiezen blijkt dat alleen de

ICCG en MG methoden efficiënt blijven.

Methode	$N = 10^3$	$N = 10^6$	$N = 10^9$
Gauss eliminatie	10^7	10^{14}	10^{21}
Gauss-Jacobi	10^5	10^{10}	10^{15}
Gauss-Seidel	10^5	10^{10}	10^{15}
SOR	10^4	10^8	10^{12}
CG	10^4	10^8	10^{12}
ICCG	$3 * 10^3$	10^7	$3 * 10^{10}$
multi-grid	10^4	10^7	10^{10}

Tabel 2: Het aantal bewerkingen voor verschillende iteratieve methoden voor verschillende waarden van N, voor een 3D Poisson probleem.

Om de iteratieve methoden toe te lichten wil ik een eenvoudig voorbeeld gebruiken. Stel we beschouwen twee soorten broedvogels, X en Y, waarbij het aantal paren X aangegeven wordt met x en het aantal paren Y aangegeven wordt met y. Stel dat vogel X per paar twee nestholten nodig heeft, één om te broeden en één om te slapen, terwijl vogel Y met één nestholte per paar genoegen neemt. In het beschouwde bosperceel zijn 50 nestholten beschikbaar, zo dat geldt:

$$2x + y = 50.$$

Verder heeft vogel X aan één blok voldoende om zijn voedsel te vinden, terwijl vogel Y twee blokken nodig heeft. Omdat er 55 voedselblokken beschikbaar zijn geldt:

$$x + 2y = 55.$$

Eenvoudig is na te gaan, dat de exacte oplossing gegeven wordt door $x = 15$ en $y = 20$. Als we dit stelsel oplossen met de Gauss Jacobi methode dan gaat dit aldus. Kies een startbenadering, bijvoorbeeld $x_0 = 0$ en $y_0 = 0$. Om de volgende benadering (x_1, y_1) te vinden, lossen we x_1 en y_1 op uit:

$$2x_1 + y_0 = 50,$$

$$x_0 + 2y_1 = 55.$$

De oplossing hiervan wordt gegeven door $x_1 = 25$ en $y_1 = 27.5$. Zo doorgaande vinden we: $x_2 = 11.25$ en $y_2 = 15$, $x_3 = 17.5$ en $y_3 = 21.875$, $x_4 = 14.0625$ en $y_4 = 18.75$, ... en we zien dat er snelle convergentie optreedt naar de exacte oplossing $x = 15$ en $y = 20$. Het is aardig om dit zelf ook eens te proberen met andere aantallen beschikbare nestholten en voedselblokken. De andere iteratieve methoden werken vergelijkbaar, maar worden alleen ingewikkelder om uit te leggen. Na deze introductie wil ik verder gaan om de huidige situatie en de toekomst van de numerieke wiskunde te schetsen.

Toekomst numerieke wiskunde

In Delft zal het onderzoek van de numerieke wiskunde groep zich richten op het ontwikkelen van snelle oplosmethoden voor grote lineaire stelsels en het ontwikkelen van geschikte discretisatie methoden voor partiële differentiaalvergelijkingen. We zullen beide hieronder bespreken.

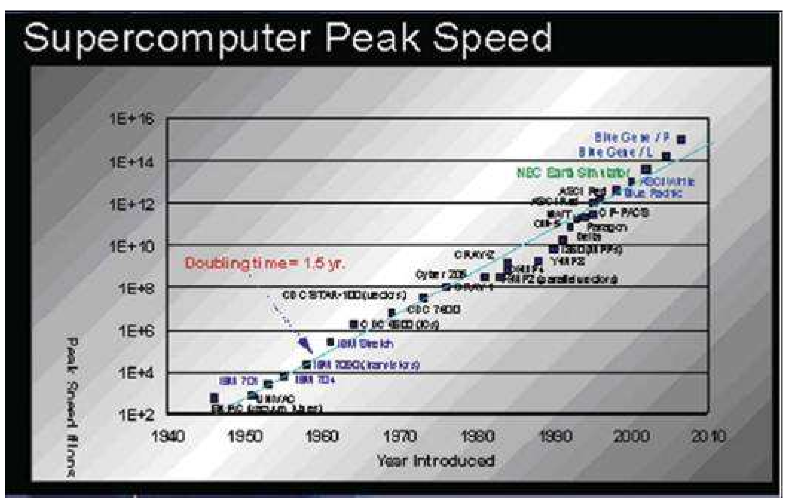
Iteratieve oplosmethoden

Bij bijna alle problemen uit de numerieke wiskunde moeten grote lineaire stelsels opgelost worden. In de toekomst zal dit steeds vaker gebeuren door gebruik te maken van geavanceerde iteratieve methoden. De vooruitgang gaat op twee fronten: het beschikbaar komen van steeds snellere processoren en het ontwerpen van snellere iteratieve oplosmethoden.

De toename van de rekenkracht als functie van de tijd

In de ICT wordt de wet van Moore vaak gebruikt :

> *De Wet van Moore stelt dat het aantal transistors op een computerchip door de technologische vooruitgang elke 18 maanden verdubbelt.*[3]



[3] http://nl.wikipedia.org/wiki/Wet_van_Moore

De toename in rekenkracht wordt geillustreerd in bovenstaande figuur. Opmerkelijk hierbij is de gestage toename in rekenkracht, die in overeenstemming is met de wet van Moore. Verder valt op dat er in 1990 een afname in de groei zichtbaar is. Nadat de PC zijn intrede in de huishoudens gemaakt heeft en als massa-apparaat geproduceerd wordt, gaat de groei versneld verder. We zien nu opnieuw een vertraging optreden. Het beschikbaar komen van de zeer snelle Cell processoren, die onder andere gebruikt worden in de NVIDIA video kaart, zouden opnieuw tot een versnelling van de groei kunnen leiden. Hieronder een omschrijving van de Cell processor:

Een Cell processor is een nieuw architectuurontwerp binnen de microprocessoren. De processor bestaat uit een centrale processor gebaseerd op de 64-bit PowerPC chip van IBM, de PPE (PowerPC Processing Element), met een aantal SPE's (Synergistic Processing Elements) ter ondersteuning. Deze SPE's zijn in staat om zeer snel 128-bit single precision floating point bewerkingen uit te voeren. Iedere SPE is voorzien van een eigen geheugenruimte en cache. Ze zijn verbonden met onder meer de PPE en de geheugencontroller door een zeer snelle 128-bit brede EIB, de Element Interface Bus. [4]

Gezien de enorme rekensnelheden die bereikt kunnen worden met de Cell processor, ligt toepassing binnen supercomputers voor de hand. Uiteraard moet er dan wel rekening gehouden worden met de specifieke eigenschappen van de Cell processor [6]. Waarschijnlijk kunnen technieken die ontwikkeld zijn voor vectorcomputers ook hier gebruikt worden. De andere manier om computers te versnellen is het gebruik van massaal parallelle

[4] http://nl.wikipedia.org/wiki/Cell_Processor

computers. Computers die bestaan uit 10.000 tot 100.000 rekenprocessoren zijn geen uitzondering meer. Opnieuw stelt dit hoge eisen aan het ontwikkelen van geschikte snelle iteratieve methoden.

De Delftse numerieke wiskunde groep is toonaangevend bij het ontwikkelen van snelle en robuuste oplosmethoden. Hieronder wil ik een aantal mijlpalen noemen. Het onderzoek is niet gestopt bij zo'n mijlpaal, wij gaan ook in de toekomst op de ingeslagen weg verder.

In de periode 1980-1990 was Piet Wesseling één van de pioniers bij het toepassen van de recent ontwikkelde multi-grid methode op de gediscretiseerde Navier Stokes vergelijkingen [27].

Piet Wesseling en Peter Sonneveld waren één van de eersten die multi-grid methoden en Krylov methoden met elkaar vergeleken hebben. Dit leidde tot steeds betere methoden (competitie). Eén daarvan, de CGS methode was in deze periode heel populair [8].

Daarna heeft Henk van der Vorst in zijn Delftse jaren de Bi-CGSTAB methode ontwikkeld [15]. Het artikel waarin deze methode beschreven is, is het meest geciteerde wiskunde-artikel uit de periode 1990-2000. Nog steeds is de Bi-CGSTAB methode één van de populairste Krylov methoden in de wereld.

In deze periode is in Delft ook aangetoond onder welke voorwaarden de GMRES methode superlineair convergeert [16]. Deze resultaten helpen enorm bij het begrijpen en verbeteren van de convergentie van GMRES.

Een andere Delftse methode uit deze tijd, GMRESR, staat ook nog steeds in de aandacht en is een goed compromis tussen snelheid en robuustheid [17].

Recent is er een nieuwe methode ontwikkeld, IDR(s), door Martin van Gijzen en Peter Sonneveld [9]. Hoewel de beschrijving van deze methode nog niet in een tijdschrift verschenen is, heeft de methode al heel wat aandacht getrokken. Dit blijkt onder andere uit een recent rapport verschenen in het Japans, waaruit blijkt dat de IDR(s) methode factoren sneller kan zijn dan de Bi-CGSTAB methode.

De kracht van IDR(s)

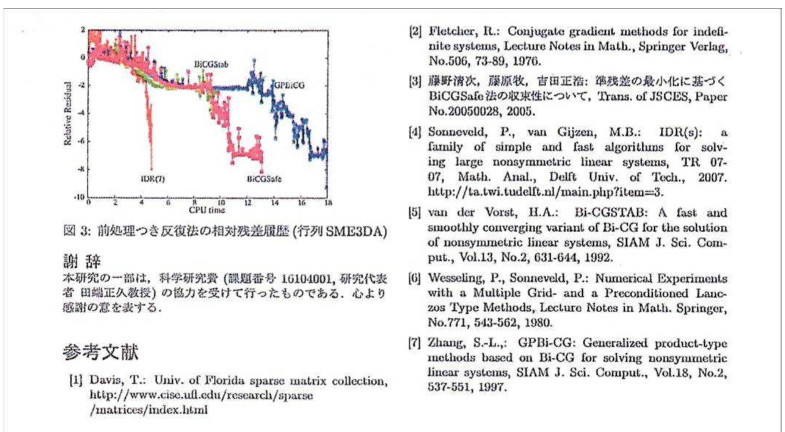


図 3: 前処理つき反復法の相対残差履歴 (行列 SME3DA)

謝 辞

本研究の一部は，科学研究費 (課題番号 16104001, 研究代表者 田端正久教授) の協力を受けて行ったものである．心より感謝の意を表する．

参考文献

[1] Davis, T.: Univ. of Florida sparse matrix collection, http://www.cise.ufl.edu/research/sparse /matrices/index.html

[2] Fletcher, R.: Conjugate gradient methods for indefinite systems, Lecture Notes in Math., Springer Verlag, No.506, 73-89, 1976.

[3] 藤野清次，藤原牧，吉田正浩: 準残差の最小化に基づく BiCGSafe 法の収束性について，Trans. of JSCES, Paper No.20050028, 2005.

[4] Sonneveld, P., van Gijzen, M.B.: IDR(s): a family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric linear systems, TR 07-07, Math. Anal., Delft Univ. of Tech., 2007. http://ta.twi.tudelft.nl/main.php?item=3.

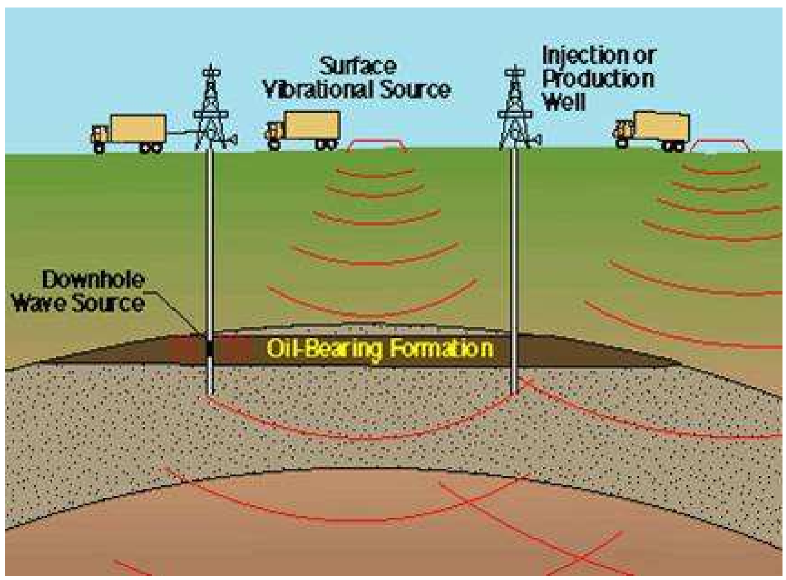
[5] van der Vorst, H.A.: Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., Vol.13, No.2, 631-644, 1992.

[6] Wesseling, P., Sonneveld, P.: Numerical Experiments with a Multiple Grid- and a Preconditioned Lanczos Type Methods, Lecture Notes in Math. Springer, No.771, 543-562, 1980.

[7] Zhang, S.-L.,: GPBi-CG: Generalized product-type methods based on Bi-CG for solving nonsymmetric linear systems, SIAM J. Sci. Comput., Vol.18, No.2, 537-551, 1997.

Veel moderne iteratieve methoden zijn een combinatie van een Krylov methode en een zogenaamde preconditionering. Ook hier heeft Delft een aantal belangrijke stappen gezet. De combinatie, ILU preconditionering met GMRES, bleek bij toepassing op de incompressibele Navier Stokes vergelijkingen heel succesvol [21]. Ook het gebruik van multi-grid als preconditionering is al vroeg in Delft voorgesteld en toegepast. Deze combinatie is op dit moment een klassieker in bijna alle simulatiepakketten.

Vanaf 2000 is er gewerkt aan het ontwikkelen van iteratieve methoden voor de Helmholtz vergelijking. De Helmholtz vergelijking wordt onder andere gebruikt om geluidsgolven te voorspellen (seismiek). Lange tijd bleek dat het aantal iteraties explodeerde als het golfgetal toenam. Recent is er in onze groep een operator based preconditionering ontwikkeld, waarbij het aantal iteraties hoogstens lineair afhangt van het golfgetal [3]. Binnen korte tijd was deze methode toonaangevend en behoort nu tot de snelste methoden om de Helmholtz vergelijking op te lossen.



Als laatste wil ik aandacht geven aan second-level preconditioneringen. In 1997 onderzocht ik samen met Guus Segal en Koos Meijerink van Shell hoe de poreuze media vergelijkingen (grondwater en oliestroming) efficiënt opgelost konden worden. Het bleek dat een klein aantal componenten de convergentie enorm vertraagden. Het idee was toen om deze componenten op een andere manier aan te pakken. Dit leidde tot de Deflated ICCG methode [23]. Op dit moment is dit opnieuw één van de snelste en robuuste methoden om problemen op te lossen met grote sprongen in de coefficiënten. Onderzoek van deze methode is erg dynamisch en actief en levert nog wekelijks nieuwe resultaten op [10].

Hieronder nog wat opmerkingen over de toekomstige ontwikkelingen van iteratieve methoden:

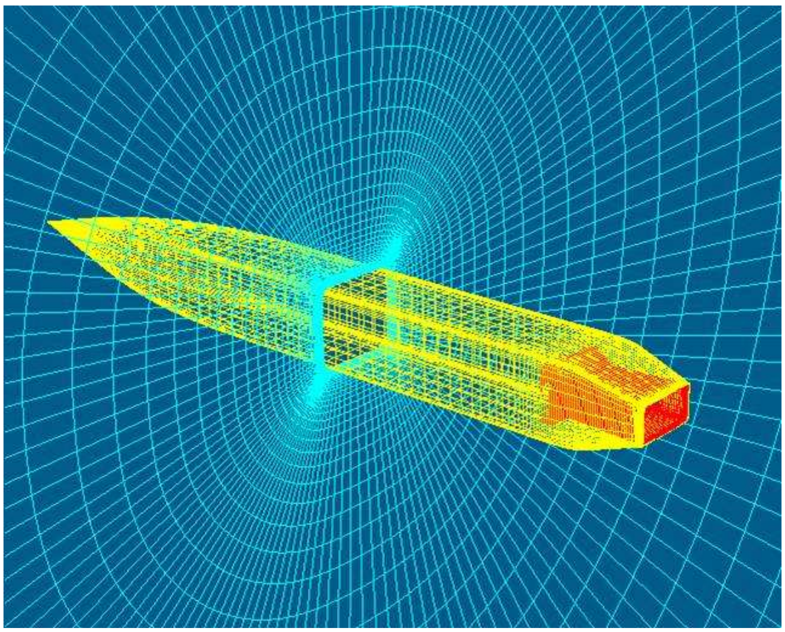
- Steeds meer zal er gezocht worden naar black box methoden en methoden die zichzelf aanpassen aan het op te lossen probleem (self adaptive methods).
- Inner-outer iteratieve methoden zullen steeds populairder worden.
- Complexe stelsels zullen opgedeeld worden in eenvoudige onderdelen (bouwstenen), die met 'standaard' iteratieve methoden opgelost kunnen worden.
- Parallelle methoden voor massaal parallelle computers of computers met meer 'nodes on a chip' hebben de toekomst.
- Acceptatie van iteratieve methoden door toepassers is alleen mogelijk als de methoden robuust zijn en er een betrouwbare schatting is van de fout in het uiteindelijke antwoord.
- De zoektocht naar snellere iteratieve methoden gaat onverminderd door.

Voordat ik inga op de ontwikkelingen van discretisatie methoden voor partiële differentiaalvergelijkingen, wil ik nu mijn titel **Berekend in Delft** toelichten. We zien dat de wetenschap in het begin van de vorige eeuw voornamelijk berustte op twee pijlers: experimenteel en theoretisch onderzoek. In de tweede helft van de 20$^{\text{e}}$ eeuw is daar een derde pijler tussen gekomen: simulatie ofwel rekenen met de computer. Als we dit toepassen op de TU Delft, dan hebben we dus: Made in Delft, Invented in Delft en **Computed in Delft**. Rekenen gebeurt heel veel in Delft en de Delftse ingenieur staat bekend als een goede rekenaar. Dat moeten we zo houden. In mijn visie is **Berekend in Delft** een kwaliteitsmerk, een soort KEMA-KEUR[5]. Als dit stempel er op staat, dan zit het wel goed en als ze het in Delft niet kunnen uitrekenen vergeet het dan maar. Ik en mijn groep zullen ons inzetten om het keurmerk **Berekend in Delft** nog sterker te maken.

[5]KEMA-KEUR is in Nederland een begrip dat een synoniem is van veiligheid. http://nl.wikipedia.org/wiki/KEMAKEUR

Discretisatie methoden

Het is bekend dat veel wiskundige modellen gebruik maken van partiële differentiaalvergelijkingen. Deze vergelijkingen zijn in het algemeen niet analytisch op te lossen. Eén manier om dit aan te pakken is om de partiële differentiaalvergelijking om te schrijven naar eenvoudiger vergelijkingen op kleine gebiedjes met behulp van een rekenrooster.



Opnieuw geef ik enkele mijlpalen. In de Delftse numerieke wiskunde groep is als eerste een eindig elementen-pakket (SEPRAN) ontwikkeld voor algemene problemen, inclusief stromingsproblemen beschreven door de incompressibele Navier Stokes vergelijkingen. Generaties Delftse studenten hebben het vak geleerd, door gebruik te maken van het SEPRAN pakket [19].

In onze groep is ook gewerkt aan een eindig volume-methode

(DEFT) om de Navier Stokes vergelijkingen op te lossen [29]. Deze methode is gebaseerd op solide wiskundige principes. Het blijkt dat de uitkomsten van dit pakket een zeer hoge nauwkeurigheid hebben. In een verdere ontwikkeling zijn de methoden geschikt gemaakt om zowel de compressibele als de incompressibele Navier Stokes vergelijkingen in één probleem op te lossen (Mach onafhankelijk simuleren) [13]. Onze groep was daarin uniek en veel van onze ideeën zijn of worden overgenomen door andere groepen.

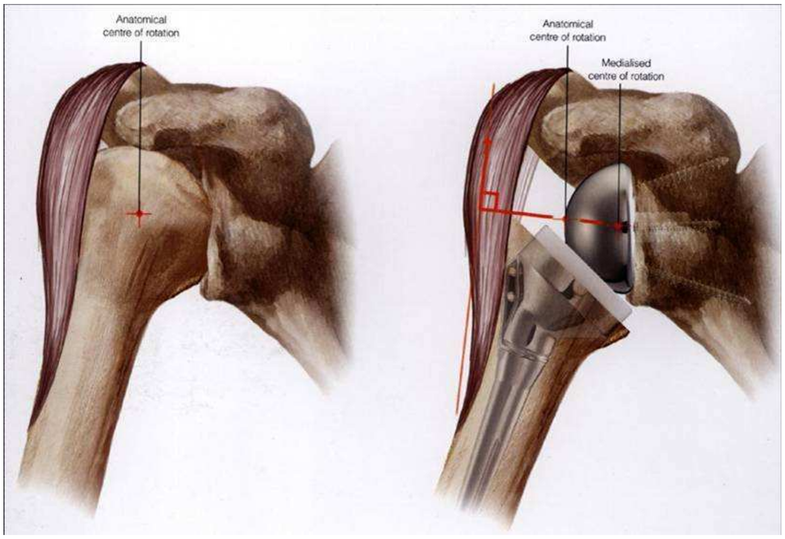
Als laatste noem ik de druk-correctie methode ontwikkeld door Jos van Kan. Zijn artikel [18] is volgens Google Scholar 188 keer geciteerd in de literatuur.

Een belangrijke toepassing van ons onderzoek naar geschikte discretisatie methoden zijn de zogenaamde bewegende randproblemen. Als voorbeeld kan men denken aan een blok ijs van nul graden dat zich in een glas cola van 20 graden bevindt. Door de hoge temperatuur van de cola zal het ijsblokje smelten. Om dit te simuleren moet de warmtevergelijking opgelost worden op een gebied dat verandert (de ijsrand beweegt) in de loop van de tijd. Dit zijn numeriek wiskundig gezien uitdagende problemen. Wij hebben onder andere numerieke methoden ontwikkeld voor:

- chemisch etsen [22] (productie integrated circuits), onder andere door gebruik te maken van variationele ongelijkheden;

- vector Stefan problemen [5], (materiaalkunde, geneeskunde) dit werk wordt voornamelijk gedragen door Fred Vermolen [20];

- twee fase stroming [12] (cavitatie bij scheepsschroeven);
- opstijgende bellen [14] (scheiding van olie en water);
- smelt- en stolproblemen [1] (Blu ray disc).



Ik verwacht dat in de toekomst de volgende onderwerpen belangrijk zullen zijn bij het ontwikkelen van goede discretisatie methoden:

- Het modelleeraspect: omdat de methoden steeds beter worden, kunnen de methoden toegepast worden op ingewikkelder modellen. Er zullen minder subgrid modellen gebruikt worden, hetgeen de betrouwbaarheid van de resultaten zal vergroten (bijvoorbeeld van het $k - \epsilon$ turbulentie model, naar DNS: Directe Numerieke Simulatie).
- Adaptive Mesh Refinement (AMR) methoden zullen steeds meer toegepast worden om een optimale mix te verkrijgen

tussen een grof rekenrooster, waar het kan, en een fijn rekenrooster, waar het moet.

- Drie (of hoger) dimensionale modellen zullen standaard worden.
- Het is van groot belang dat de gediscretiseerde vergelijkingen de fysische eigenschappen behouden: behoud van massa, positiviteit, incompressibiliteit, etc.
- Niet alleen het antwoord is van belang, maar een betrouwbare foutschatting (vaak gecombineerd met AMR) zal steeds vaker verlangd worden.
- Mijn vermoeden is dat afhankelijk van het probleem verschillende technieken: FDM, FVM, FEM, BEM, DG en meshless methoden ingezet zullen blijven worden.
- Tenslotte verwacht ik dat goede postprocessing, visualisatie, ordeverhoging van de fout in de resultaten, nauwkeurige berekening van afgeleide grootheden (bijvoorbeeld de kromming voor het bepalen van de oppervlaktespanning) steeds belangrijker zullen worden.

Relatie met andere wetenschapsgebieden

Binnen de wiskunde heeft numerieke wiskunde veel raakvlakken met differentiaalvergelijkingen, functionaalanalyse en lineaire algebra. Er is al heel lang een uitwisseling van ideeën en methoden tussen discrete optimalisatie en numerieke lineaire algebra. Omdat het oplossen van partiële differentiaalvergelijkingen steeds efficiënter gaat, verwacht ik dat bij continu optimaliseren ook steeds meer numerieke optimalisatiemethoden gebruikt zullen worden. Nu gebeurt dit nog vaak door het inzetten van menselijke denkkracht. Dit laatste zal uiteraard niet verdwijnen, maar de numerieke optimalisatiehulpmiddelen kunnen het ontwerpproces aanzienlijk versnellen.

Delft Centre for Computational Science and Engineering

Buiten de wiskunde wordt de numerieke wiskunde in tal van gebieden gebruikt, zoals Computational Fluid Dynamics (vliegtuigen, schepen, zeestromingen), Computational Mechanics (bruggen, gebouwen, banden), Computational Chemistry (ontwerpen van nieuwe medicijnen, optimale chemische reactoren), Computational Finance, Computational Biology, etc. In dit verband is het Delft Centre for Computational Science and Engineering [6] heel belangrijk. Als een spin in haar web heeft het Delft Centre for Computational Science and Engineering de meeste Delftse rekengroepen bij elkaar gebracht. Dit heeft de afgelopen vijf jaar tot veel synergie geleid en wij zullen ons inzetten om het centrum te continueren en het succes verder uit te bouwen.

Een motiverend voorbeeld

Ik wil het gedeelte over numeriek wiskundig onderzoek afsluiten met een motiverend voorbeeld. Op dit moment staat het klimaatonderzoek in het middelpunt van de belangstelling. Het CO_2 debat houdt de gemoederen bezig. Men vraagt zich af hoeveel en waarom de temperatuur van de atmosfeer toeneemt.

[6] http://www.cse.tudelft.nl

Omdat ik geen klimatoloog ben, kan ik niet zo veel zeggen over de correctheid van de gebruikte wiskundige modellen (stelsels van gekoppelde niet-lineaire partiële differentiaalvergelijkingen). Wat wel duidelijk is, is dat deze modellen enorm gecompliceerd zijn. Op elk deelgebied, voorspelling van wind, wolken, neerslag, oceaanstroming etc., is nog veel onderzoek nodig. Waar ik op dit moment wel bezorgd over ben, is de betrouwbaarheid van de gebruikte numerieke modellen en methoden. Door de geweldige complexiteit kunnen slechts grove rekenroosters gebruikt worden. De gebruikte roosterafstand is op dit moment 400 km, terwijl voor numerieke weersvoorspelling lokaal roosterafstanden van 20 km gebruikt worden. Een roosterafstand van 400 km betekent dat Nederland en de Noordzee nauwelijks zichtbaar zijn op zo'n grid. Het betekent ook dat de Warme Golfstroom in de Atlantische Oceaan niet meegenomen kan worden (in het model). De invloed hiervan kan hoogstens via een subgrid model verwerkt worden. Dit leidt tot veel extra constanten, waarvan de waarde moeilijk te bepalen is. [7]

Door gebruik te maken van snellere processoren, zoals de eerder genoemde Cell processor en door numerieke methoden te ontwerpen die sneller en robuuster zijn, zullen de roosterafstanden kleiner worden, zodat het aantal subgrid modellen sterk zal afnemen. Omdat de impact van de subgrid modellen op het uiteindelijke antwoord groot kan zijn, pleit ik ervoor om aan de ingevoerde constanten niet één waarde toe te kennen, maar een zekere bandbreedte aan te geven waar de waarde tussen zal liggen. Hiermee zou dan een schatting gegeven kunnen worden van de betrouwbaarheid van de modellen. Hetzelfde geldt

[7] voor meer informatie zie: Geosciences Conference tackles global issues, SIAM News, page 1, June, 2007

voor de numerieke oplosmethoden: niet alleen het antwoord is belangrijk, maar ook een indicatie van de fout is noodzakelijk. Een mogelijkheid om dit te onderzoeken is een globale roosterverfijning. Opnieuw geeft dit aan dat een verbetering van de rekenmethoden en een versnelling van de computers urgent zijn.

Management

Zoals bekend is een hedendaagse professor niet alleen goed in wetenschap, maar hij of zij moet ook een goed manager zijn. Ik heb daarom onlangs meegedaan aan de Human Resource Management cursus [8]. Ik stond daar wat sceptisch tegenover, maar na de eerste module: *Leidinggeven aan professionals? Niet doen!* begon ik heel enthousiast te worden [26]. Ik heb heel veel van de cursus geleerd. Om mijn ideale leidinggevende te typeren maak ik gebruik van twee citaten, beide al zeer oud:

A leader is best when people barely know he exists, not so good when people obey and acclaim him, worse when they despise him. But a good leader, who talks little, when the work is done, his aim is fulfilled, they will say: we did it ourselves [9]

en

En zo wie van u de eerste zal willen worden, die zal aller dienstknecht zijn. [10]

Ik zal het eerste citaat in mijn eigen woorden weergeven:

[8] HRM 22 gecoordineerd door Jaap van Splunter
[9] citaat Lao-tse, 600 voor Christus, http://nl.wikipedia.org/wiki/Lao_Tse
[10] Bijbel; Markus 10:44

- van een goede leider heb je geen last;
- een matige leider is iemand, die gehoorzaamd wordt;
- een slechte leider is iemand, waar men een hekel aan heeft; en
- de beste leider is iemand, die weinig praat en als het werk gedaan is en men vraagt aan de werknemers, wie de leider was, dan antwoorden deze: "Die is er helemaal niet, wij hebben het zelf gedaan".

Zo'n leider wil ik zijn.

Onderwijs

Tenslotte mijn opmerkingen over onderwijs. Onze decaan zegt altijd: "We hebben de volgende verdeling in belangrijkheid: 51 % onderwijs en 49 % onderzoek". Ik ben het daar volledig mee eens. De Technische Universiteit Delft is een onderwijsinstelling, dus onderwijs geven is onze hoofdtaak. Echter om toponderwijs te geven, heb je toponderzoek nodig. Dus beide zijn heel belangrijk, echter als er een conflict ontstaat, dan heeft onderwijs de hoogste prioriteit.

Het geven van goed onderwijs is ook in ons eigen belang. Als je toponderwijs geeft dan kun je de beste (afstudeer)studenten aantrekken. Deze vormen een bron van goede AIO's, die uit kunnen groeien tot toponderzoekers, zodat de cirkel gesloten is. Door een goed alumnibeleid leveren goede studenten een prima netwerk op in de industrie, grote onderzoeksinstellingen en het MKB. Ik vind dat ons onderwijs en onderzoek aansprekend moet zijn van 8 tot 80 jarigen. Dit motiveert mij ook om actief te zijn bij voorlichtingen aan scholieren, onderwijs geven aan Bachelor, Master en PhD studenten en open te staan voor vragen van bedrijven en de maatschappij.

Onderwijs op de middelbare school

In mijn opinie moet het mogelijk zijn om in Nederland Beter Onderwijs[11] te geven. Er moet een grote nadruk komen op kennis en formule- en taalvaardigheden. Jonge mensen zijn in een unieke positie om dit soort kennis en vaardigheden op te doen. Het werken aan competenties vind ik op de middelbare school minder belangrijk. Voldoende herhaling is volgens mij van levensbelang, dus niet alleen haakjes wegwerken in de 2^{e} klas, maar ook in de 3^{e}, 4^{e}, 5^{e} en 6^{e} klas. Dan pas zit het er goed in en herkent de student of scholier patronen waarmee hij later zijn voordeel kan doen. Je wordt geen topvoetballer door alleen eredivisiewedstrijden te spelen, maar door heel vaak eenvoudige oefeningen te doen. Verder is bekend dat de grafische rekenmachine alleen gebruikt wordt op de middelbare school. In mijn opinie moeten dit soort hulpmiddelen beperkt ingezet worden. Dus alleen vanuit het oogpunt 'gebruiken om te leren' en niet 'leren om te gebruiken'.

Over de kwaliteit van de Nederlandse scholier en student ben ik niet ontevreden. De zo verguisde zesjescultuur kom ik op de TU Delft niet zo veel tegen. De meeste studenten ontwikkelen zich tot gedreven onderzoekers. Het komt regelmatig voor dat afstudeerwerk gepubliceerd wordt in internationale tijdschriften

[11] http://www.beteronderwijsnederland.nl/

[24]. Onlangs heeft een studente haar werk tijdens haar afstudeerstage gepresenteerd aan een internationale conferentie[12]. Ik vind dit een geweldige prestatie.

Als laatste voorbeeld van de gedrevenheid van onze studenten wil ik de volgende anekdote geven. Vorig voorjaar kreeg ik het verzoek van het bedrijf Rollerlift om een numeriek model te maken van hun innovatieve wielen, die eenvoudig over een stoeprand kunnen rollen. Toevallig kwamen wij in aanraking met een eerstejaars natuurkundestudent, die het vervelend vond om in de zomervakantie niets te doen te hebben, waarbij hij zijn kennis kon toepassen. Onder begeleiding van Fons Daalderop heeft hij dit probleem binnen vier weken volledig opgelost, een prima verslag geschreven en een simulatieprogramma in Maple afgeleverd. Rollerlift heeft dit direct ingezet bij hun onderhandeling met een groot Duits bedrijf, die overweegt om de wielen in productie te nemen. Met dit type studenten redt de TU het wel.

Welke kwaliteiten heeft een student nodig om een goede onderzoeker te worden?

1. Intelligentie, zonder dit gaat het niet lukken;

2. Inzet, op de middelbare school lukt het misschien wel om met weinig werken voldoendes te halen, op de TU Delft moet er hard gewerkt worden. Ik sluit mij aan bij de opmerking van mijn oud-collega Blauwendraad: "Wij prikkelen de hersenen van de studenten tot de pijngrens";

3. Creativiteit, onderzoek gaat niet uit van standaardoplos-

[12] http://ta.twi.tudelft.nl/nw/users/vuik/numanal/slingerland.html

singen, onverwachte ideeën zijn van levensbelang;

4. Het hebben van een droom: beroemd worden, een onopgelost problemen kraken, een maatschappelijk probleem oplossen etc., leidt vaak tot extra motivatie.

Studenten met deze eigenschappen motiveren mij enorm in mijn werk en hopelijk motiveer ik hen om zich verder te ontwikkelen.

ICT en het onderwijs

Numerieke wiskunde heeft altijd voorop gelopen bij het gebruik van ICT in het onderwijs. Het doen van numerieke practica gebeurt al meer dan veertig jaar op computers. Maar ook bij andere vormen van ICT in het onderwijs liepen we vaak voorop: vakinformatie geven via internet, automatische toetsen afnemen via ITEMS-D en ETUDE, videocolleges, Blackboard etc. [13] Toch vind ik dat ICT of e-learning niet altijd het juiste antwoord is. Het blijkt dat studenten een enthousiaste wiskundedocent, die aan het einde van de les volledig bedekt is met krijt, ook enorm waarderen. Een ander voorbeeld: e-mail is een geweldig medium om afspraken te maken, maar minder geschikt bij gevoelige discussies en bij het uitleggen van wiskunde lijkt het al snel op intellectueel zaklopen.

Mijn advies over ICT in het onderwijs: laat de professionals en docenten zelf kiezen wat ze willen gebruiken. De één werkt liever met een powerpoint presentatie, de ander vertelt liever

[13] http://ta.twi.tudelft.nl/nw/users/vuik/wi3097/wi3097CT.html, http://ta.twi.tudelft.nl/nw/users/vuik/numanal/wijngaarden.html

een verhaal. Wat belangrijk is, is het product. Als het product goed is, dan doen de gebruikte hulpmiddelen er niet toe.

Onderwijs en numerieke wiskunde

Tenslotte nog een opmerking voor (toekomstige) afstudeerstudenten. Numerieke wiskunde heeft al een lange traditie: Newton, Gauss, Hilbert etc. hebben bijgedragen aan de ontwikkelingen. Na de opkomst van de computer heeft de numerieke wiskunde een stormachtige ontwikkeling doorgemaakt. Het idee zou kunnen zijn, dat de numerieke wiskunde nu min of meer af is. Ik hoop in deze rede duidelijk gemaakt te hebben, dat dit niet het geval is. De numerieke wiskunde is springlevend, de op te lossen problemen zijn urgent en uitdagend en de nieuwe soorten computers zullen leiden tot nieuwe numerieke methoden. Op de ICIAM 2007 wereldconferentie was er een workshop georganiseerd over de toekomst van de numerieke wiskunde. Mijn collega Volker Mehrmann van de TU Berlijn, merkte toen op: 'The golden age of numerical analysis has not started yet!' [14] Ik ben het daar volkomen mee eens en daag jullie, studenten, uit om samen met ons die gouden eeuw van de numerieke wiskunde dichterbij te brengen, de onopgeloste problemen op te lossen en het merk **Berekend in Delft** te versterken.

Tenslotte

Ik wil graag afsluiten met een dankwoord.

Geachte leden van het College van Bestuur en het bestuur van de faculteit Elektrotechniek, Wiskunde en Informatica, ik wil u van harte bedanken voor mijn benoeming.

Ik wil mijn leermeesters bedanken: Prof. Piet Wesseling, Ir. Jan de Groot, Prof. Bram van der Sluis, Prof. Emil Bertin en Prof. Henk van der Vorst.

Ik wil de leden van DIAM bedanken, in het bijzonder de leden van de numerieke wiskunde groep, ik vind de samenwerking geweldig.

Ik bedank het ondersteunend personeel.

Ik wil het bestuur en andere vrijwilligers van de studievereniging Christiaan Huygens bedanken voor de hulp om goed onderwijs te geven, de geweldige studiereis naar China [15] en de benoeming van mij tot Lid van Verdienste.

[14] voor meer informatie zie: The golden age of numerical analysis has not yet started!, SIAM News, page 8, October, 2007

[15] http://ch.tudelft.nl/china2006/

Ik wil alle Delftse studenten bedanken, ik heb veel van jullie geleerd.

Hierna nog mijn persoonlijke dankwoorden.

Ik dank God, Schepper van hemel en aarde [2].

Ik wil mijn familie en kennissen bedanken voor de vriendschap en steun. Ik denk met dankbaarheid terug aan mijn ouders. Mijn dank gaat uit naar mijn broers en zusters, jullie hebben mij vaak geholpen en mij daardoor in staat gesteld me volledig te kunnen ontplooien. Als laatste dank ik mijn vrouw, Magda en onze kinderen, Jacolien, Thea, Adriaan, Nelleke, Giske, Dies en Hans. Zonder jullie liefde en steun kan ik niets doen. Waar ik ook in de wereld ben er is maar één plek waar ik thuis ben, bij jullie.

Ik heb gezegd.

Referenties

[1] J.H. Brusche, A. Segal, H.P. Urbach, and C. Vuik. Towards solving a moving boundary problem within a multi-layered recording stack. In A. Bermúdez de Castro, D. Gómez, P. Quintela, and P.Salgado, editors, *Numerical Mathematics and Advanced Applications, Proceedings of ENUMATH 2005, the 6th European Conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications*, pages 585–592, Berlin, 2006. Springer.

[2] Cees Dekker, Ronald Meester, and René van Woudenberg. *Schitterend ongeluk of sporen van ontwerp?* Ten Have, Baarn, 2005.

[3] Y.A. Erlangga, C.W. Oosterlee, and C. Vuik. A novel multi-grid based preconditioner for heterogeneous Helmholtz problems. *SIAM J. Sci. Comput.*, 27:1471–1492, 2006.

[4] G.H. Golub and C.F. van Loan. *Matrix Computations third edition*. The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1996.

[5] E. Javierre, C. Vuik, F.J. Vermolen, and A. Segal. A level set method for three dimensional vector Stefan problems: Dissolution of stoichiometric particles in multi-component alloys. *Journal of Computational Physics*, 224:222–240, 2007.

[6] Julie Langou, Julien Langou, Piotr Luszczek, Jakub Kurzak, Alfredo Buttari, and Jack Dongarra. Exploiting the performance of 32 bit floating point arithmetic in obtaining

64 bit accuracy. Report ut-cs-06-574, University of Tennessee, Knoxville, 2006.

[7] Y. Saad. *Iterative methods for sparse linear systems, Second Edition.* SIAM, Philadelphia, 2003.

[8] P. Sonneveld. CGS, a fast Lanczos-type solver for nonsymmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 10:36–52, 1989.

[9] Peter Sonneveld and Martin B. van Gijzen. IDR(s): a family of simple and fast algorithms for solving large nonsymmetric linear systems. Report 07-07, Delft University of Technology, Delft Institute of Applied Mathematics, Delft, 2007.

[10] J.M. Tang, R. Nabben, C. Vuik, and Y.A. Erlangga. Theoretical and numerical comparison of various projection methods derived from deflation, domain decomposition and multigrid methods. Report 07-04, Delft University of Technology, Delft Institute of Applied Mathematics, Delft, 2007.

[11] U. Trottenberg, C.W. Oosterlee, and A. Schüller. *Multigrid.* Academic Press, London, 2000.

[12] D.R. van der Heul. *A staggered scheme for nonconvex hyperbolic systems of conservation laws.* PhD thesis, Delft University of Technology, Delft, 2002.

[13] D.R. van der Heul, C. Vuik, and P. Wesseling. A conservative pressure correction method for flow at all speeds. *Computers and Fluids*, 32:1113–1132, 2003.

[14] S.P. van der Pijl, A. Segal, C. Vuik, and P. Wesseling. A mass-conserving Level-Set method for modelling of multi-phase flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 47:339–361, 2005.

[15] H.A. van der Vorst. Bi-CGSTAB: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for solution of non-symmetric linear systems. *SIAM J. Sci. Stat. Comp.*, 13:631–644, 1992.

[16] H.A. van der Vorst and C. Vuik. The superlinear convergence behaviour of GMRES. *J. Comp. Appl. Math.*, 48:327–341, 1993.

[17] H.A. van der Vorst and C. Vuik. GMRESR: a family of nested GMRES methods. *Num. Lin. Alg. Appl.*, 1:369–386, 1994.

[18] J. van Kan. A second-order accurate pressure-correction scheme for viscous incompressible flow. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 7:870–891, 1986.

[19] J. van Kan, A. Segal, and F. Vermolen. *Numerical Methods in Scientific Computing*. VSSD, Delft, 2005.

[20] F.J. Vermolen, E. Javierre, C. Vuik, L. Zhao, and S. van der Zwaag. A three-dimensional model for particle dissolution in binary alloys. *Computational Materials Science*, 39:767–774, 2007.

[21] C. Vuik. Solution of the discretized incompressible Navier-Stokes equations with the GMRES method. *Int. J. for Num. Meth. Fluids*, 16:507–523, 1993.

[22] C. Vuik and C. Cuvelier. Numerical solution of an etching problem. *J. Comp. Physics*, 59:247–263, 1985.

[23] C. Vuik, A. Segal, and J.A. Meijerink. An efficient preconditioned CG method for the solution of a class of layered problems with extreme contrasts in the coefficients. *J. Comp. Phys.*, 152:385–403, 1999.

[24] C. Vuik, A. Segal, J.A. Meijerink, and G.T. Wijma. The construction of projection vectors for a Deflated ICCG method applied to problems with extreme contrasts in the coefficients. *Journal of Computational Physics*, 172:426–450, 2001.

[25] C. Vuik, P. van Beek, F. Vermolen, and J. van Kan. *Numerieke Methoden voor Differentiaalvergelijkingen*. VSSD, Delft, 2006.

[26] M. Weggeman. *Leidinggeven aan professionals? Niet doen!* Scriptum, Schiedam, 2007.

[27] P. Wesseling. Multigrid methods in computational fluid dynamics. *Z. Angew. Math. Mech.*, 70:337–347, 1990.

[28] P. Wesseling. *An Introduction to Multigrid Methods*. R.T. Edwards, Inc., Philadelphia, 2004.

[29] P. Wesseling, A. Segal, and C.G.M. Kassels. Computing flows on general tree-dimensional nonsmooth staggered grids. *J. Comp. Phys.*, 149:333–362, 1999.